

# Pregled teorijskih i eksperimentalnih spoznaja o topološkim izolatorima

---

Milačić, Juraj

Master's thesis / Diplomski rad

2019

*Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj:* **University of Zagreb, Faculty of Chemical Engineering and Technology / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije**

*Permanent link / Trajna poveznica:* <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:149:208858>

*Rights / Prava:* [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

*Download date / Datum preuzimanja:* **2024-11-26**



*Repository / Repozitorij:*

[Repository of Faculty of Chemical Engineering and Technology University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE  
SVEUČILIŠNI DIPLOMSKI STUDIJ

Juraj Milačić

**DIPLOMSKI RAD**

Zagreb, rujan 2019.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
FAKULTET KEMIJSKOG INŽENJERSTVA I TEHNOLOGIJE  
SVEUČILIŠNI DIPLOMSKI STUDIJ

Juraj Milačić

**PREGLED TEORETSKIH I EKSPERIMENTALNIH SPOZNAJA  
O TOPOLOŠKIM IZOLATORIMA**

**DIPLOMSKI RAD**

Mentor: izv. prof. dr. sc. Vladimir Dananić

Članovi ispitnog povjerenstva:

izv. prof. dr. sc. Vladimir Dananić

prof. dr. sc. Vesna Volovšek

prof. dr. sc. Stanislav Kurajica

Zagreb, rujan 2019.

*Diplomski rad izrađen je na Zavodu za fiziku na Fakultetu kemijskog inženjerstva i tehnologije  
Sveučilišta u Zagrebu.*

*Zahvaljujem profesoru dr.sc. Vladimiru Dananiću na izvrsnom mentorstvu, ukazanoj pomoći, susretljivosti, korisnim savjetima i razumijevanju tijekom izrade diplomskog rada te na svom prenesenom znanju.*

*Zahvaljujem svim profesorima Fakulteta kemijskog inženjerstva i tehnologije na prenesenom znanju i ukazanoj pomoći tijekom studiranja.*

*Zahvaljujem cijeloj obitelji, a posebno roditeljima Ljerki i Aleksandru te sestri Ini na kontinuiranoj podršci kroz cijelo akademsko obrazovanje.*

*Zahvaljujem djevojci Mireli na podršci tijekom izrade diplomskog rada.*

## SAŽETAK

Unazad nekoliko desetljeća, u fizici kondenzirane materije pojavila su se nova topološka stanja materije koja pokazuju zanimljiva elektronska svojstva. Prema teoriji vrpca, za čiju fundamentalnu pretpostavku uzimamo kvantnu mehaniku elektrona u periodičkom potencijalu, pretpostavljalo se da su svi izolatori jednaki, ali topološka teorija je pokazala da postoji novo egzotično stanje kvantne materije. Topološki izolatori su materijali, tj. kvantno stanje materije, koji se u unutrašnjosti ponašaju kao izolatori, dok na svojim rubovima (2D) odnosno površinama (3D) posjeduju neobična elektronska stanja slična metalima koja mogu voditi električnu struju. Vodljiva površinska stanja su topološki zaštićena simetrijom vremenske inverzije te nisu osjetljiva na male promjene. Iako se ovo područje razvija u dobrom smjeru, još je potreban velik napredak kako došli do spoznaje o svim neobičnim svojstvima ove materije.

**Ključne riječi:** kondenzirana materija, teorija vrpca, topološki izolatori, površinska stanja, fermioni

## SUMMARY

In recent decades, in condensed matter physics new topological states of matter have emerged that show interesting electronic properties. In the band theory of solids, where quantum mechanics of electrons moving in periodic potential of the ionic lattice is the fundamental assumption, it was assumed that all band insulators are essentially equivalent, but topological theory showed that there exists a new exotic state of quantum matter. Topological insulators are materials, or in another words quantum state of matter, that show insulator behavior in the bulk of material, but on the edges(2D) /surfaces(3D) they have unusual metal-like electron states that can conduct electricity. Conducting surface states are topological protected by time-reversal symmetry and are not sensitive to smooth deformations. Even though this field is growing in the right direction, major progress is still needed in order to discover all about these unusual properties of matter.

**Key words:** condensed matter, band theory, topological insulators, surface states, fermions

# SADRŽAJ

1. UVOD.....	1
2. OPĆI DIO.....	3
2.1. DRUDEOVA TEORIJA METALA.....	3
2.1.1. ELEKTRIČNI TRANSPORT U METALIMA.....	3
2.1.2. ELEKTRIČNA VODLJIVOST METALA.....	5
2.1.3. HALL EFEKT I MAGNETOOTPOR.....	6
2.1.4. TERMOELEKTRIČNA SVOJSTVA METALA.....	8
2.2. SOMMERFELDOVA TEORIJA METALA.....	10
2.2.1. FERMI-DIRACOVA RASPODJELA.....	10
2.5. TOPOLOŠKA STANJA MATERIJE.....	11
2.5.1. TOPOLOGIJA.....	11
2.5.2. TOPOLOŠKA TEORIJA VRPCA.....	13
2.5.3. BERRYJEVA FAZA.....	27
2.5.4. TOPOLOGIJA U JEDNOJ DIMENZIJI (1D).....	29
2.5.5. KVANTNI HALL EFEKT.....	38
2.5.6. KVANTNI SPIN HALL EFEKT.....	45
2.6. 3D TOPOLOŠKI IZOLATORI.....	53
2.6.1. SLABI TOPOLOŠKI IZOLATORI.....	54
2.6.2. JAKI TOPOLOŠKI IZOLATORI.....	54
2.6.3. PRVI 3D TOPOLOŠKI IZOLATOR: $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ .....	55
2.6.4. DRUGA GENERACIJA 3D TOPOLOŠKIH MATERIJALA: $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ .....	58
2.6.5. WEYLOVI POLUMETALI.....	64
2.7. PRIMJENA TOPOLOŠKIH IZOLATORA.....	65
2.7.1. MAJORANA FERMIONI.....	65
3. EKSPERIMENTALNI DIO.....	67
3.1. SVRHA RADA.....	67
3.2. SINTEZA TOPOLOŠKIH IZOLATORA.....	67
4. RASPRAVA I ZAKLJUČAK.....	69
5. POPIS SIMBOLA.....	70
6. LITERATURA.....	73
7. ŽIVOTOPIS.....	75



## 1. UVOD

Fizika kondenzirane materije je područje znanosti koje se bavi proučavanjem ponašanja čestica na određenoj konačnoj gustoći i pri niskim temperaturama, gdje zavisno o faktorima kao što su primijenjeni tlak, dopiranje određenim materijalima, spin čestica itd. materija se može reorganizirati u različite faze. Općenito, faze materije se dijele na čvrsto, tekuće i kapljevito, ali kvantna mehanika predviđa postojanje određenih stanja materije koje su neshvatljive „očima klasične mehanike“. Neka od tih stanja su supravodiči, feromagnetni i antiferomagnetni, Bose-Einsteinov kondenzat te topološki izolatori. U svim kvantno mehaničkim stanjima, glavni princip karakterizacije materije se zasniva na prekidu simetrije. Kao primjer može se uzeti feromagnet koji posjeduje cjelokupnu magnetizaciju koja nastaje prekidom rotacijske simetrije spina nakon čega dolazi do usmjeravanja magnetskih dipola u istom smjeru. Topološki izolatori (TI) predstavljaju novo egzotično stanje kvantne materije jer se u unutrašnjosti ponašaju kao izolatori dok na svojim rubovima tj. površini posjeduju neobična elektronska stanja slična metalima koja mogu voditi električnu struju. Kako bi se to jasnije prikazalo, može se reći da se topološki izolatori ponašaju kao plastična cijev prekrivena tankim slojem metala. Plastična cijev simbolizira izolator, dok tanki sloj metala na njejoj površini predstavlja vodič, tj. vodljiva površinska stanja. Za razliku od uobičajenih materijala, kod ovakvih površinskih stanja ne dolazi do povratnog raspršivanja elektrona niti do defekata u kristalu upravo zbog snažnih spin-orbitalnih interakcija u kombinaciji sa simetrijom vremenske inverzije (engl. „Time reversal symmetry“). To nam ukazuje na činjenicu da su ova površinska stanja topološki zaštićena, što znači da za razliku od običnih površinskih stanja, topološka ne mogu biti uništena zbog nečistoća i nesavršenosti. Topološki izolatori se nazivaju izolatorima jer kao i konvencionalni izolatori u masi materijala imaju energetski procjep između valentne i vodljive vrpce, ali zbog kvantno-mehaničkih svojstava, na rubovima 2D materijala tj. rubnim površinama 3D materijala, dolazi do nastanka spiralnih stanja. U rubnim elektronskim stanjima nema energijskog procjepa te su ona zaštićena simetrijom vremenske inverzije i istovremeno zaslužna za vodljivost materijala i pokretanje elektrona po površini. Vodljiva površina nije specifična samo za topološke izolatore, budući da i neki poluvodiči i klasični izolatori također mogu podržavati

vodljiva površinska stanja. Masa materijala (engl. „Bulk“) završava s površinom na kojoj se događa prijelaz koji vodi do promjene u strukturi elektronske vrpce što se objašnjava manjim potencijalom površine u odnosu na potencijal ostatka materijala. Zbog te razlike potencijala dolazi do formiranja novih elektronskih stanja na površini materijala koja nastaju zbog oštrog prijelaza iz čvrstog materijala koji završava s površinom te se mogu pronaći samo na atomskim slojevima na površini. Otkriće topoloških izolatora ima velik utjecaj na područje fizike kondenzirane materije te je dovelo do mnogih istraživanja kojima je cilj karakterizacija samih materijala i njihovih svojstava za potencijalnu tehnološku primjenu kao što su Majorana fermioni, spintronika i kvantno računalstvo.

## 2. OPĆI DIO

### 2.1. DRUDEOVA TEORIJA METALA

Metali zauzimaju specijalno mjesto u proučavanju čvrstih tvari. Odlični su vodiči topline i naboja, plastično se deformiraju i laki su za oblikovanje. Iako većina krutina ima nemetalna svojstva, metali igraju ključnu ulogu u teoriji čvrstog stanja. Čisti elementi preferiraju metalno stanje; više od dvije trećine ih pripada metalima. Čak i za razumjeti nemetale, treba poznavati metale. Kroz zadnjih su sto godina fizičari pokušavali konstruirati jednostavne modele metalnog stanja, koji uzimaju u obzir kvalitativna svojstva te u nekim modelima i kvantitativna. U ovom će se poglavlju razmotriti Drudeov model metalne vodljivosti. Iako je jedan od jednostavnijih modela, još uvijek se koristi kao praktičan način za brze aproksimacije određenih svojstava, čiji izračuni pokazuju vrlo kompleksna rješenja. U okviru Drudeovog modela, biti će predstavljena otpornost materijala i transport naboja u magnetskom polju, konkretno Hallova vodljivost. Također će biti spomenuti i ukratko opisani Seebeckov koeficijent i magnetootpor. Za opširan opis, ipak su potrebni napredniji modeli. Većinski dio ovog poglavlja, preuzet je iz knjige: Fizika čvrstog stanja te iz diplomskog rada kolege Gudca sa Prirodoslovno-matematičkog fakulteta u Zagrebu. <sup>[5][12]</sup>

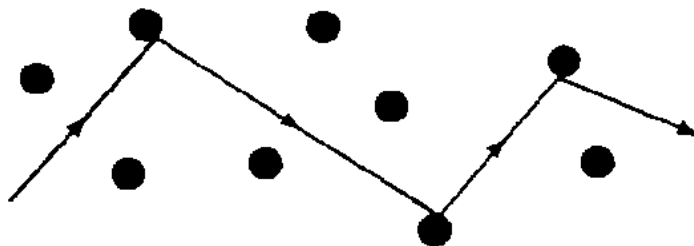
#### 2.1.1. ELEKTRIČNI TRANSPORT U METALIMA

Thomsonovo je otkriće elektrona imalo velik utjecaj na teorije o strukturi tvari i ponudilo je mehanizam vodljivosti kod metala. Nedugo nakon Thomsonovog otkrića, Drude je napravio teoriju električne i termalne vodljivosti primjenjujući veoma uspješnu teoriju plinova na metale, smatrajući elektrone slobodnim plinom. Teorija plinova se bazira na jednoj vrsti prisutnih čestica, za razliku od metala u kojima osim elektrona, kao negativno nabijene čestice, moraju postojati i neke pozitivno nabijene čestice, s obzirom da je metal kao cjelina neutralan. Drude je pretpostavio da su pozitivno nabijene čestice mnogo teže od elektrona i smatrao ih je nepokretnima. U njegovom modelu pozitivne čestice formiraju metal dok se negativne čestice, elektroni, kreću slobodno kroz metal. Uz jednostavan račun može se doći do gustoće elektronskog plina u metalu, koji je nekoliko redova veličine veći od gustoće čestica plina pri normalnim temperaturama i tlaku. Uz razliku u gustoći i interakcijama elektron-elektron i ion-

elektron, Drudeov model koristi kinetičke teorije neutralnih rijedih plinova za opis elektronskog plina uz nekoliko osnovnih pretpostavki: <sup>[5][12]</sup>

1. Interakcija elektrona sa ostalim elektronima i ionskom rešetkom je zanemarena između sudara. Bez vanjskog električnog polja, putanja je svakog elektrona pravocrtna. U slučaju sa nametnutim vanjskim poljem, elektroni se kreću prema Newtonovom zakonu i pritom se zanemaruju komplicirana polja koja stvaraju ostali elektroni i ioni. <sup>[5][12]</sup>

2. Sudari se u Drudeovom modelu, kao i u kinetičkoj teoriji, mogu definirati kao trenutni događaji koji mijenjaju brzinu elektrona. Elektroni se prema Drudeu sudaraju sa nepokretnim pozitivno nabijenim ionima, dok su sudari elektron-elektron zanemarivi. Bitna je razlika u odnosu na kinetičku teoriju plinova što se tamo čestice sudaraju sa ekvivalentnim česticama, dok ovdje imamo dvije različite. <sup>[5][12]</sup>



Slika 1. Putanja vodljivog elektrona u jednostavnom Drudeovom modelu. Elektroni se sudaraju sa nepokretnim ionima rešetke. <sup>[12]</sup>

3. Smatrat ćemo da elektron sudjeluje u sudaru sa vjerojatnošću u jediničnom vremenu  $1/T$ . Vrijeme  $T$ , poznato kao "relaksacijsko vrijeme", jedna je od fundamentalnih veličina u teoriji metalne vodljivosti. Iz toga slijedi da slučajno odabrani elektron putuje između sudara  $T$  vremena. <sup>[5][12]</sup>

4. Elektroni postižu termodinamičku ravnotežu sa okolinom isključivo kroz sudare. Odmah nakon sudara, elektronu se mijenja vektor brzine u novu vrijednost koja je nepovezana sa onom prije sudara. <sup>[5][12]</sup>

### 2.1.2. ELEKTRIČNA VODLJIVOST METALA

Prema Ohmovom zakonu, struja  $I$  koja putuje kroz žicu, proporcionalna je padu napona  $V$  duž žice:  $V=IR$ , gdje otpor žice  $R$  ovisi samo o dimenzijama vodiča, a ne i o jakosti struje ili padu potencijala. Ovisnost  $R$  o obliku žice, generalno se eliminira uvođenjem otpornosti  $\sigma$ , koja je definirana kao konstanta proporcionalnosti između električnog polja  $E$  u točki metala i gustoće struje  $j$  koju inducira: <sup>[5][12]</sup>

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}. \quad (1)$$

Gustoća struje  $j$  je vektor paralelan toku naboja, a magnituda mu je određena količinom naboja, koja u jediničnom vremenu prođe kroz jediničnu površinu okomitu u odnosu na tok. Ako imamo određenu struju  $I$ , koja teče kroz žicu duljine  $L$  i poprečnog presjeka  $A$ , gustoća struje će biti  $j=I/A$ . Pad potencijala duž žice iznosi  $V=EL$ , pa iz jednadžbe (1) slijedi  $V = (\rho L) j/A$ . Ako se  $n$  elektrona iz jediničnog volumena kreće brzinom  $v$ , gustoća struje koju oni čine, biti će paralelna vektoru  $v$  i iznositi će: <sup>[5][12]</sup>

$$\mathbf{j} = -en\mathbf{v}. \quad (2)$$

U bilo kojoj točki metala, elektroni se uvijek gibaju u velikom broju smjerova velikim brojem različitih brzina. Ukupna gustoća struje je dana jednadžbom (2), gdje je  $v$  prosječna brzina nosioca naboja, koja bez prisustva vanjskog električnog polja nestaje. S druge strane, u prisustvu vanjskog električnog polja, postojat će srednja brzina elektrona u smjeru suprotnog polja. Za primjer možemo uzeti elektron iz metala u vremenu  $t = 0$ . Vremenska oznaka  $t$  označava vrijeme nakon sudara. Brzina elektrona u trenutku  $t$ , biti će zbroj njegove brzine  $v_0$  s kojom izlazi iz sudara i dodatne brzine  $-eEt/m$  koja potječe od vanjskog električnog polja. S obzirom da elektron izlazi iz sudara u nasumičnom smjeru, neće biti doprinosa  $v_0$  srednjoj elektronskoj brzini, već će ona u potpunosti biti određena prosjekom  $-eEt/m$ . Prosjek vremena  $t$  je relaksacijsko vrijeme  $T$  iz čega slijedi: <sup>[5][12]</sup>

$$\mathbf{v}_{avg} = -\frac{e\mathbf{E}T}{m}; \quad \mathbf{j} = \left(\frac{ne^2T}{m}\right)\mathbf{E}. \quad (3)$$

Dobiveni se izraz često izražava pomoću vodljivosti  $\sigma = 1/\rho^2$ :

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}; \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (4)$$

Od navedenih fizikalnih veličina nije nam poznato relaksacijsko vrijeme. Pomoću izmjerenih otpornosti, izračunata je tipična vrijednost relaksacijskih vremena ( $10^{-14} - 10^{-15}$  s). Prije opisivanja električnih svojstava u magnetskom polju, potreban je izraz za promjenu momenta elektrona između sudara, a za to nam koristi reformulirani izraz za gustoću struje: <sup>[5][12]</sup>

$$\mathbf{j} = -\frac{ne\mathbf{p}(t)}{m}. \quad (5)$$

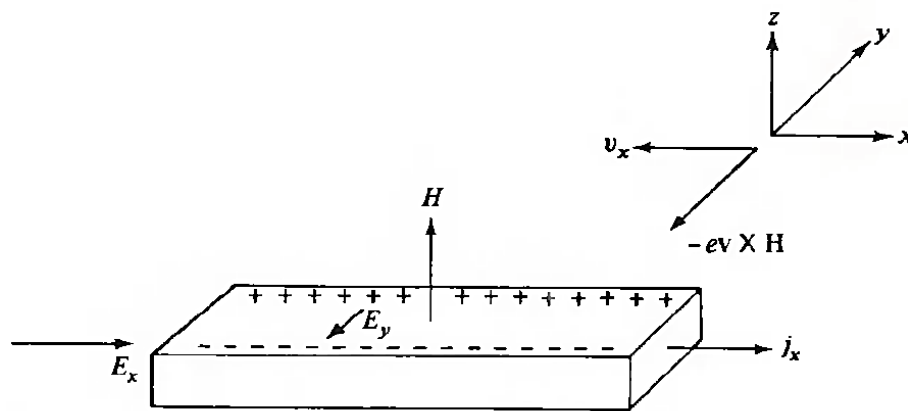
### **2.1.3. HALL EFEKT I MAGNETOOTPOR**

Prema Amperovom zakonu, vodič postavljen u magnetsko polje, otklonit će se ukoliko kroz njega teče struja. Hall je pretpostavio da sila djeluje na nosioce naboja u vodiču, a ne na cijeli vodič te da će se nosioci naboja gomilati na jednoj strani vodiča. Gomilanje nosioca naboja na jednoj strani vodiča dovodi do stvaranja transversalnog električnog polja, koje se u eksperimentu može mjeriti transversalnom razlikom potencijala zvanom Hallovim naponom. Električno polje  $E_x$ , koje je postavljeno na žicu u smjeru  $x$  i gustoća struje,  $j_x$ , teku kroz žicu. Osim električnog polja imamo i magnetsko polje  $B$  usmjereno u pozitivnom smjeru  $z$ . Kao rezultat dobivamo komponentu Lorentzove sile koja djeluje na elektrone te ih otklanja u negativnom smjeru  $y$  ( $-ev \times B$ ). Otklonjeni elektroni nemaju puno prostora u  $y$ -smjeru prije nego dođu do ruba žice. Kako se tamo gomilaju, tako se stvara električno polje u  $y$ -smjeru, koje se protivi njihovom kretanju i sprječava dodatno gomilanje. To transversalno polje (Hallovo polje,  $E_y$ ) će se u ravnoteži suprotstaviti Lorentzovoj sili i struja će teći samo u  $x$  smjeru. Dvije su veličine od interesa. Jedna od veličina je omjer električnog polja duž žice  $E_x$  sa gustoćom struje  $j_x$ , poznata kao magnetootpor ( $\rho_{xx}$ ). Druga je veličina od interesa transversalno polje  $E_y$ . S obzirom da ono poništava Lorentzovu silu, prirodno je očekivati da će biti proporcionalno magnetskom polju,  $B$ , i struji koja teče kroz žicu,  $j_x$ . <sup>[5][12]</sup>

Definira se veličina poznata kao Hallov koeficijent:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x B} \quad (6)$$

Može se primjetiti da je Hallovo polje okrenuto u negativnom y-smjeru (slika 2.) te bi prema tome i koeficijent  $R_H$  trebao biti negativan. Kada bi nosioci naboja bili pozitivni, Hallovo bi polje bilo okrenuto u suprotnom smjeru. Mjerenjem Hallovog polja možemo utvrditi o kakvim se nosiocima naboja radi. <sup>[5][12]</sup>



Slika 2. Shematski prikaz Hallovog eksperimenta. <sup>[12]</sup>

Da bi izračunali Hallov koeficijent i magnetootpor, prvo nam trebaju vrijednosti gustoće struje  $j_x$  i  $j_y$  u prisutstvu električnog polja  $E_x$  i  $E_y$  i magnetskog polja  $B$  duž  $z$  osi. Sila koja djeluje na svaki elektron iznosi  $f = -e(E + v \times B)$  pa moment elektrona postaje: <sup>[5][12]</sup>

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e\left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{p}}{m} \times \mathbf{B}\right) - \frac{\mathbf{p}}{\tau} \quad (7)$$

Da bi struja tekla samo duž vodiča, Hallovo polje  $E_y$  određeno je zahtjevom da nema transverzalne struje  $j_y$ . Iako izraz (8) govori da Hallov koeficijent ovisi samo o gustoći nosioca naboja u metalu, u praksi prilikom određivanja gustoće nosioca naboja nailazimo na problem. Generalno, postoji utjecaj magnetskog polja, temperature i kvalitete uzoraka, no za veoma

niske temperature, čiste i kvalitetne uzorke te jaka polja, vrijednosti Hallove konstante se približavaju graničnim vrijednostima (8). <sup>[5][12]</sup>

$$R_H = -\frac{1}{ne}. \quad (8)$$

Veličina  $\omega_c\tau$  je vrlo bitna bezdimenzijska mjera jakosti magnetskog polja. Kad je  $\omega_c\tau$  vrlo malen,  $j$  je gotovo paralelan s  $E$ , kao i bez prisustva magnetskog polja. Ciklotronska frekvencija  $\omega_c$ , je kutna frekvencija kretanja elektrona u magnetskom polju  $B$ . Naime, putanja elektrona u homogenom magnetskom polju je spiralna duž polja i na ravnini okomitoj na polje čini kružnicu.  $\omega_c\tau$  će imati mali iznos ako elektroni mogu završiti samo mali dio kružne putanje između sudara, a velik ako mogu završiti velik broj kružnih kretanja. Otpor ne ovisi o magnetskom polju kada je  $j_y = 0$ , odnosno u slučaju kad se uspostavi ravnoteža sa Hallovim poljem. Eksperimenti provedeni na brojnim materijalima, ne slažu se s Drudeovim modelom te je uvođenje kvantne teorije nužna za objašnjavanje određenih pojava. U stvarnom materijalu svi elektroni nemaju jednaku brzinu te je nemoguće ostvariti da utjecaj vanjskog magnetskog polja bude u potpunosti kompenziran Hallovim poljem, što često dovodi do slabe ovisnosti otpora o magnetskom polju. U slučaju kad imamo više vrsti nosioca naboja magnetsko polje će imati snažan utjecaj na otpornost. Poznati su tzv. gigantski magnetootpori u materijalima kod kojih se otpor mijenja 6 redova veličina pri polju od 10T. <sup>[5][12]</sup>

#### **2.1.4. TERMOELEKTRIČNA SVOJSTVA METALA**

Drudeov model pretpostavlja da se toplinska struja u metalu prenosi vodljivim elektronima. Pretpostavka se empirički zasniva na usporedbi vodljivosti topline metala i izolatora. Termalna vodljivost iona je mala u usporedbi sa termalnom vodljivošću vodljivih elektrona (prisutnih u metalima). Za male temperaturne gradijente, toplinska struja je proporcionalna  $\nabla T$  i zasniva se na sljedećem mehanizmu. Elektroni koji izlaze iz sudara imaju brzinu određenu lokalnom temperaturom. Što je toplije mjesto sudara, to će elektron nositi više energije i zato postoji kontinuirani rast srednje energije elektrona prema toplijem kraju materijala. Ako je elektronima dozvoljeno gibanje, oni će difundirati prema hladnijem kraju i tamo se gomilati. Nagomilani elektroni stvaraju električno polje, koje se protivi daljnjoj



akumulaciji elektrona i postiže se ravnoteža. U ravnoteži se elektroni s hladnijeg kraja mogu vratiti u topliji zbog povećane koncentracije i stvorenog električnog polja. Bitna je razlika u toku naboja što elektroni iz toplijeg dijela prenose toplinu u hladniji. Električno polje, koje se javlja u ravnoteži, naziva se Seebeckovim poljem i usmjereno je prema hladnijoj strani materijala. Elektroni koji dolaze u neko područje s toplijeg predjela, imali su posljednji sudar u području više temperature. Oni koji dolaze iz hladnijeg, posljednji su sudar imali u hladnijem predjelu pa elektroni koji dolazi iz toplijeg dijela donose više energije nego oni iz hladnijeg i time stvaraju tok topline. Konstanta proporcionalnosti između razlike potencijala i razlike u temperaturi materijala, naziva se Seebeckovim koeficijentom. <sup>[5][12]</sup>

$$S = -\frac{\Delta V}{\Delta T} \quad (9)$$

U sustavima sa slabim elektron-elektron i elektron-fonon interakcijama, linearni odgovor vodljivosti je dan sa izrazom: <sup>[5][12]</sup>

$$\sigma = \int c(E) \left( -\frac{df(E)}{dE} \right) dE, \quad (10)$$

gdje je  $c(E)$  vodljivost u ovisnosti o energiji te  $f(E)$  Fermi-Diracova raspodjela. U metalima i polumetalima se transport događa blizu Fermijeve razine te se vodljivost  $c(E)$  sporo mijenja u rasponu  $E \approx E_F \pm kT$ . Sommerfeldov razvoj  $c(E) = c(E_F) + c'(E_F)(E - E_F) + O[(E - E_F)^2]$  vodi nas do izraza za Seebeckov koeficijent metala i polumetala: <sup>[5][12]</sup>

$$S = \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 e} \frac{c'(E_F)}{c(E_F)} + O[(kT)^3], \quad \sigma_{metal} = c(E_F) + O[(kT)^2] \quad (11)$$

Za degenerirani elektronski plin, vrijednost  $c'(E_F)/c(E_F)$  je proporcionalna  $1/kT_F$ , gdje je  $T_F$  Fermijeva temperatura. Kod metala je Seebeckov koeficijent proporcionalan sa temperaturom pa se linearno približava  $S = 0$  u  $T = 0$  i poprima generalno niže vrijednosti nego koeficijenti kod poluvodiča ili izolatora. Kod poluvodiča i izolatora Seebeckov koeficijent divergira za niske temperature iz razloga što im je električna vodljivost efikasnija od toplinske vodljivosti. <sup>[5][12]</sup>

## 2.2. SOMMERFELDOVA TEORIJA METALA

### 2.2.1. FERMI-DIRACOVA RASPODJELA

Za sastavljanje modela vodljivosti, Drude je koristio kinetičku teoriju plinova po kojoj se elektroni ponašaju kao čestice plina, čija je distribucija dana Maxwell- Boltzmannovom raspodjelom. S obzirom da su elektroni fermioni, za njih vrijedi Fermi-Diracova raspodjela u stanju termodinamičke ravnoteže. Za razliku od klasične fizike, u ovom slučaju se elektroni ponašaju tako da nije moguće razlučiti dva elektrona jer su identične čestice te vrijedi Paulijev princip isključenja, prema kojemu se dva fermiona ne mogu istovremeno nalaziti u istom kvantnom stanju. Očekivani broj čestica, koje se nalaze u stanju sa energijom  $\epsilon_i$ , dan je sa izrazom: <sup>[5][12]</sup>

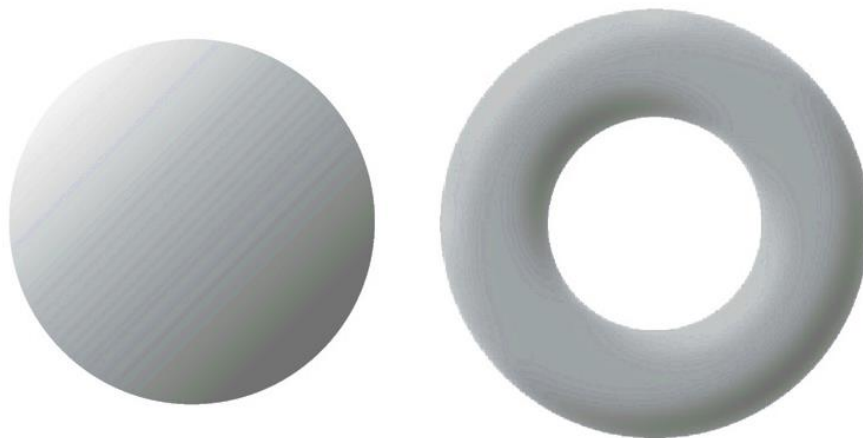
$$n_i = \frac{g_i}{e^{(\epsilon_i - \mu)/kT} + 1}, \quad (12)$$

gdje je  $n_i$  broj čestica u stanju  $i$ ,  $g_i$  degeneracija stanja  $i$ ,  $\mu$  kemijski potencijal,  $k$  Boltzmannova konstanta i  $T$  apsolutna temperatura. Pri  $T = 0\text{K}$ , fermioni zauzimaju najniža moguća stanja. Sljedeći dodani fermion će zauzeti sljedeće najniže stanje pa se energija cijelog sustava mijenja za iznos kemijskog potencijala  $\mu$ . Kemijski potencijal se pri 0 K naziva Fermijevom energijom. Fermijeva temperatura je definirana kao  $T_F = E_F/k_B$ . <sup>[5][12]</sup>

## 2.5. TOPOLOŠKA STANJA MATERIJE

### 2.5.1. TOPOLOGIJA

Topologija je grana matematike koja se bavi geometrijskim svojstvima tvari koje nisu osjetljive na male deformacije odnosno svojstvima prostora koja su sačuvana unatoč kontinuiranim deformacijama. Također proučava svojstva prostora neprekidna preslikavanja, tj. transformacije (funkcije) koje preslikavaju jedan prostor u drugi, pridružujući svakoj točki prvoga prostora jednu točku drugoga prostora tako da se ne naruši odnos "blizine" točaka u prostoru. Topološki prostor zapravo predstavlja određeni skup točaka, kao što su pozicija ( $x$ ) i količina gibanja tj. moment ( $p$ ), kojima se međudaljenost može izmjeriti kanonskom metrikom, a dva vrlo bitna svojstva koja određuju topološki prostor su povezanost i kompaktnost. Kada se govori o povezanosti, opisuje se sami prostor i što čini taj prostor, odnosno da li se prostor sastoji od dva ili više potprostora. Drugo bitno svojstvo, kompaktnost, nam govori da li postoje granice prostora ili ne. Matematički primjeri ovih svojstava su kompaktni razdjelnici koji se mogu klasificirati topološki na temelju topološke invarijante koja se naziva genus ( $g$ ).<sup>[1][2][3]</sup>



Slika 3. Površina sfere ( $g=0$ ) i torusa ( $g=1$ ) se topološki razlikuju prema genusu ( $g$ ).<sup>[1]</sup>

Najjednostavniji opis otpornosti sustava na blage deformacije može se prikazati pomoću ilustracije na slici 3. koja prikazuje jednostavne primjere dvodimenzionalnih (2D) površina u trodimenzionalnom prostoru (3D) koji se topološki razlikuju prema genusu. Ova veličina je specifična po tome što se ne mijenja pod inverznim transformacijama, isključujući procese

kidanja i ljepljenja. Pod procesima inverznih transformacija podrazumijeva se bilo koji proces koji izvrće objekte iznutra prema van ili izvana prema unutra tj. dolazi do inverzije strukture. Ako su inverzne transformacije neprekidne, onda je riječ o tzv. topološkim preslikavanjima ili homeomorfizmima koji su funkcija od jednog topološkog prostora do drugog gdje je inverzna tj. obrnuta slika bilo kojeg objekta ponovno objekt u istom topološkom prostoru. Preslikavanja se mogu shvatiti kao deformacije objekata bez kidanja i ljepljenja, kakve se mogu izvoditi sa objektima od elastične gume. Dva prostora koja se mogu jedan na drugi topološki preslikati sa stajališta su topološki ekvivalentna pa se tako mogu promatrati kugla i kocka. Prema topologiji, kocka i kugla su ekvivalentne jer se određenim deformacijama može preći iz jednog objekta u drugi i obratno. Topologija proučava određena svojstva tvari, topološke invarijante, koja se ne mijenjaju pri topološkim preslikavanjima. Jedan primjer takve topološke invarijante su dimenzije. Kada se uspoređuju kocka i kvadrat, oni nisu topološki ekvivalentni iz razloga što su različitih dimenzija, kocka 3D, a kvadrat 2D. Također jedan od primjera topološke invarijante je i genus, koji je zapravo broj rupa na objektu. Slika 3. Prikazuje sferu i torus koji su iste dimenzije, 2D, ali ipak nisu topološki ekvivalentne što se vidi prema genusu. Sfera se može lagano oblikovati u puno različitih oblika, kao što su površine diska ili posude. No sfera se ne može lagano oblikovati u oblik torusa. Sfera i torus razlikuju se po cjelobrojnoj topološkoj invarijanti koji se naziva genus. Kako se invarijanta ne može promijeniti, površine tj. objekti s različitim genusom se ne mogu deformirati jedan u drugog, stoga i jesu topološki različiti, dok su oblici koji se mogu preoblikovati iz jednog u drugog topološki ekvivalentni. Jedan takav primjer je prikazan na slici 4., gdje su šalica i torus topološki ekvivalentni zbog iste vrijednosti genusa ( $g=1$ ), odnosno zbog istog broja rupa. <sup>[1][2][3]</sup>



Slika 4. Topološka deformacija objekta s istim brojem rupa ( $g=1$ ), topološki ekvivalentni. <sup>[1]</sup>

Određivanje topoloških invarijanti koje karakteriziraju pojedini predmet zanimljiv je matematički problem. Za površinu, prema Gauss-Bonnetovom teoremu, integral Gaussove zakrivljenosti ( $K$ ) nad površinom definiran je cijelobrojnom topološkom invarijantom, koja se naziva Eulerova karakteristika. Općenitije, Eulerova karakteristika ili Eulerov broj ( $\chi$ , grč. Chi) je kvantizirana i povezana s genusom prema  $\chi = 2 - 2g$ , a opisuje oblik i strukturu topološkog prostora bez obzira na način na koji je zakrivljen. <sup>[1][2][3]</sup>

$$\chi = \frac{1}{2\pi} \int_S K dA \quad (13)$$

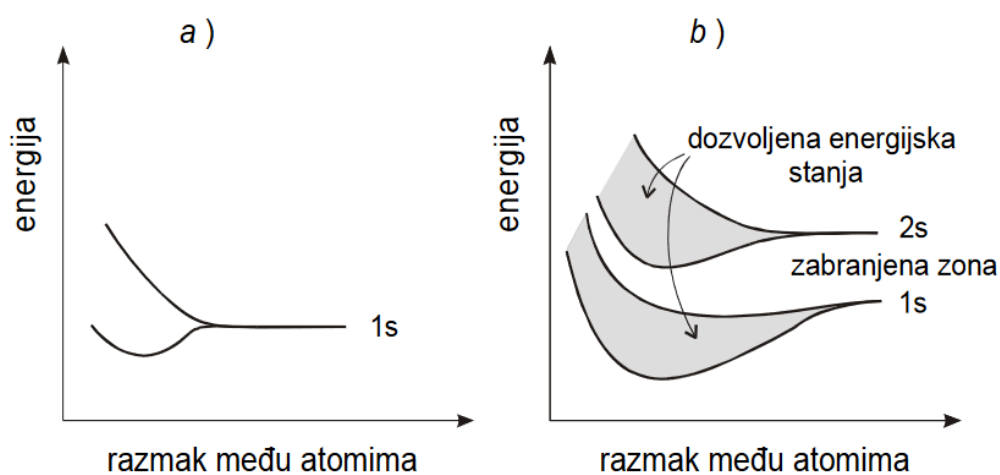
Može se provjeriti da je  $\chi = 2$  za sferu ( $g=0$ ,  $\chi = 2 - 2g = 2 - 0 = 2$ ), te prema istoj formuli izračunati da je  $\chi = 0$  za torus i šalicu. <sup>[1][2][3]</sup>

### **2.5.2. TOPOLOŠKA TEORIJA VRPCA**

Topologija je prerasla u granu koja se primijenjuje i na druge grane znanosti, posebice fiziku. Otkriće topoloških izolatora je dovelo do saznanja o novim stanjima kvantne materije koja imaju velik utjecaj na područje fizike kondenzirane materije. Iako je primjer sa sferom, torusom i šalicom vrlo jednostavan, principi topoloških izolatora su slični. I topološke invarijante koje nas zanimaju vezano uz topološke izolatore su slične, ali karakteriziraju apstraktnije predmete. To se može približiti činjenicom da je topologija elektroničkih materijala uzrokovana "preklapanjem" valnih funkcija elektrona. Kako bi se pobliže objasnila klasifikacija faza materije na topološkoj razini, potrebno je shvatiti topološku klasifikaciju izolatora. Izolatorsko stanje materijala je najosnovnije stanje u kojemu se materija može nalaziti. Najjednostavniji izolator je atomski izolator, u kojemu su elektroni vezani za atomske jezgre. Takav materijal je električki inertan što proizlazi iz činjenice da je potrebna određena konačna energija da se elektron izbaci tj. odvoji od jezgre. Jače interakcije između atoma u kristalu dovode do povezivanja atoma pomoću kovalentnih veza. Jedan od bitnijih uspjeha kvantne mehanike u 20. stoljeću je otkriće teorije vrpca koja nam omogućuje opisivanje elektronske strukture materije. <sup>[1][3][4][5]</sup>

Vrpčasta struktura materije je posljedica gibanja gotovo slobodnog elektrona u periodičkom potencijalu kristalne rešetke za normalne metale, odnosno posljedica aproksimacije čvrste veze tj. tuneliranja valentnih elektrona između prvih susjeda za prijelazne metale i poluvodiče. Vrpčasta teorija krutina ukratko se sastoji od slijedećeg. Po Paulievom principu isključivosti, u

jednom atomu mogu postojati samo dva elektrona istih energija, ali suprotnih elektronskih spinova. Budući da je elektrone bolje shvatiti kao oblak električnog naboja, tj. elektronski oblak, onda je gustoća tog elektronskog oblaka mjerilo vjerojatnosti da se elektron nađe na nekom mjestu. Ako se zamisli da se atomi u plinovitom stanju, na primjer dva atoma, međusobno približavaju, onda će se na nekoj udaljenosti među atomima ostvariti takvi uvjeti da će valentni elektroni oba atoma postati zajednički, odnosno početak će se preklapati njihovi elektronski oblaci. Time bi se narušilo Pauliev kvantni princip, što se ne može dogoditi. Stoga mora doći do promjene energijskih stanja elektronskih oblaka (orbitala) koji se preklapaju. Ta se promjena događa tako da se svako energijsko stanje plinovitog atoma dijeli na dva nova stanja, s višom i nižom energijom u odnosu na početno stanje (slika 5. (a)). Ako se međusobno približe tri atoma, tada će se svako energijsko stanje tih atoma razdijeliti na tri nova. <sup>[6][7]</sup>

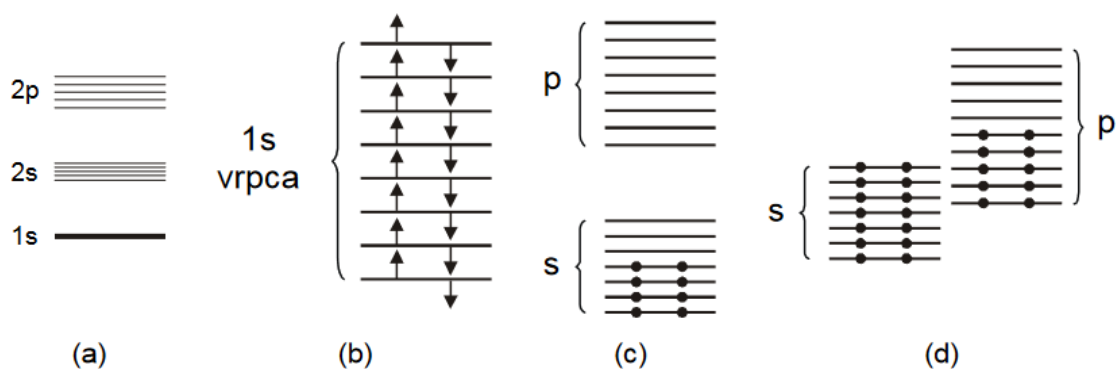


Slika 5. Cijepanje energetske razine: a) 2 atoma istog energijskog stanja ; b) nastajanje vrpce <sup>[6]</sup>

Na toj osnovi možemo razumjeti i cijepanje energijskih nivoa u realnom čvrstom tijelu. Zamislimo  $N$  atoma u jednodimenzionalnom kristalu. Neka se nalaze na udaljenosti mnogo puta većoj od normalne konstante rešetke  $d_0$ . Tada između njih nema međudjelovanja. Raspodjela kvantnih stanja je u stvari jednaka onoj u jednom atomu, a pojavljuje se  $N$  puta. To znači da se svaki energijski nivo koji odgovara jednom kvantnom stanju pojavljuje  $N$  puta, jednom za odgovarajuće kvantno stanje svakog atoma. Kada se razmak među atomima smanjuje, situacija se mijenja, međudjelovanje je sve veće, a shema energijskih nivoa iz osnove se mijenja. Stanja u

kristalu nisu ograničena samo na jedan atom, nego se šire po čitavom kristalu. Energijski nivoi cijepaju se u  $N$  energijskih stanja. Kako je  $N$  velik i broj stanja je velik. Ona su gusto smještene i tvore energijsku vrpce prikazanu na slici 5.(b). Ako na primjer, ima 1022 atoma u  $1\text{ cm}^3$  s jednim valentnim elektronom, tada će biti 1022 energijskih nivoa. Očigledno je da razlike između ovih nivoa moraju biti vrlo male, jer ako je, npr. ukupna energija nivoa 10 eV, slijedi da je razlika između dva podnivoa  $1 \times 10^{-21}$  eV. Stoga je pogodnije smatrati da svi ti elektroni pripadaju jednoj kontinuiranoj energijskoj vrpce. Međutim, elektronska energetska stanja mogu biti grupirana ne samo u jednu vrpce. Obično se grupiraju u dvije vrpce: energijski nižu, valentnu te energijski višu, vodljivu vrpce. Grupiranje elektrona iz unutrašnjih nivoa, koji su bliži atomskoj jezgri, u stvarnosti se rijetko događa budući da to zahtijeva teško ostvarivo, vrlo jako međusobno približavanje atoma, tako da je ovdje dovoljno uzeti u obzir samo valentne elektrone. U energijskoj vrpce proizvedenoj međudjelovanjem i dalje ima mjesta za sve elektrone, jer se ukupni broj kvantnih stanja nije promijenio. Treba zapamtiti dvije stvari: broj kvantnih stanja u vrpce jednak je broju kvantnih stanja energijskog nivoa od kojeg je vrpce nastala, a svako kvantno stanje pojavljuje se u vrpce  $N$  puta. Širina vrpce proizvedene od nekog energetskog stanja ne zavisi od broja atoma u kristalu. Područje energije između dviju vrpce, koje ne sadrži dopuštene energijske nivoe na kojima se nalaze elektroni naziva se zabranjena zona  $E_g$ . U određenom čvrstom tijelu atomi se nalaze na točno određenom razmaku  $d_0$ . Za duboke energijske nivoe bliže atomskoj jezgri poremećaj je malen, pa je i cijepanje neznatno. Za valentne elektrone cijepanje može biti vrlo veliko, čak toliko da se u nekim situacijama susjedne vrpce prekrivaju. Elektroni se u vrpce smještaju po Paulievu principu: u svaki nivo možemo smjestiti 2 elektrona. Uzmimo 1s vrpce i čvrsto tijelo s  $N$  atoma, čiji svaki atom ima 2 elektrona u 1s stanju (slika 6.(b)). Takva 1s vrpce bit će potpuno popunjena jer je  $N$  stanja zauzeto s  $N$  elektrona. Vrpce, koje odgovaraju stanjima valentnih elektrona ili vanjskih elektrona mogu biti i djelomično popunjene. Slučaj djelomične popunjenosti javlja se i onda kada se dvije ili više vrpce prekrivaju (slika 6. (c) i 6.(d)). Zaposjednutost dozvoljenih energetskih stanja elektronima daje nam objašnjenje za razlike u električnoj vodljivosti izolatora, poluvodiča i metala. Električna vodljivost proporcionalna je broju elektrona koje je moguće ubrzati poljem. Govoreći jezikom kvantne fizike, to znači da je elektron podignut na viši energijski nivo. Ako su svi energijski nivoi

u vrpce zaposjednuti, to neće biti moguće, osim ako se elektron ne ekscitira u gornju praznu energijsku vrpce. No taj proces zahtijeva veliku količinu energije i malo je vjerojatan za mala električna polja. <sup>[6][7]</sup>

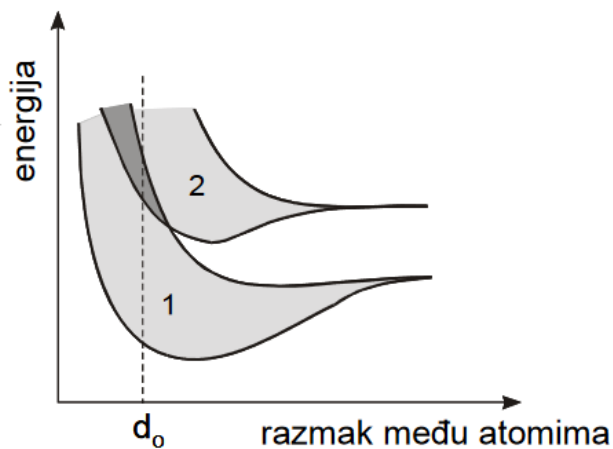


Slika 6. Energijski nivoi i vrpce u čvrstom tijelu: (a) duboki energijski nivoi atoma, (b) potpuno popunjena 1s vrpca, (c) djelomično popunjena energijska vrpca i (d) djelomično popunjena energijska vrpca nastala preklapanjem dviju vrpce. <sup>[6]</sup>

Vidimo dakle da će proces vodljivosti biti moguć ako za elektrone postoje susjedni prazni energijski nivoi u koje oni mogu prijeći. To objašnjava zašto unutrašnji elektroni u metalima ne doprinose vodljivosti. Ako su sva energetska stanja valentne vrpce zaposjednuta elektronima, onda elektron (iz vanjskog električnog izvora) za sebe nema energijsko mjesto, odnosno nema slobodan put kroz vrpce, pa nema niti pokretnih elektrona. Međutim, ako sva energetska stanja valentne vrpce nisu zaposjednuta elektronima, onda postoji mogućnost za elektron da se kroz taj slobodan energijski prolaz giba u smjeru električnog polja. Što je vrpca manje zaposjednuta, to ima više pokretnih elektrona. Valentna i vodljiva vrpca mogu se prekrivati, što je posebno važno kada je valentna vrpca popunjena. Budući da je vodljiva vrpca nepopunjena, dakle ima slobodne energijske nivoe, preklapanjem te dvije vrpce omogućuje da elektroni iz popunjene valentne vrpce prijeđu u nepopunjenu vodljivu vrpce, gdje pod djelovanjem polja postaju pokretni, vodljivi elektroni. Veće prekrivanje dopušta većem broju elektrona da dospiju u slobodna energetska stanja (bez utroška aktivacijske energije). Budući da postoji velik broj valentnih elektrona, zatim velik broj praznih energijskih nivoe, materijal tih osobina pokazivat će veliku elektronsku vodljivost, tj. metalni karakter što je prikazano na slici 7. Alkalijski metali



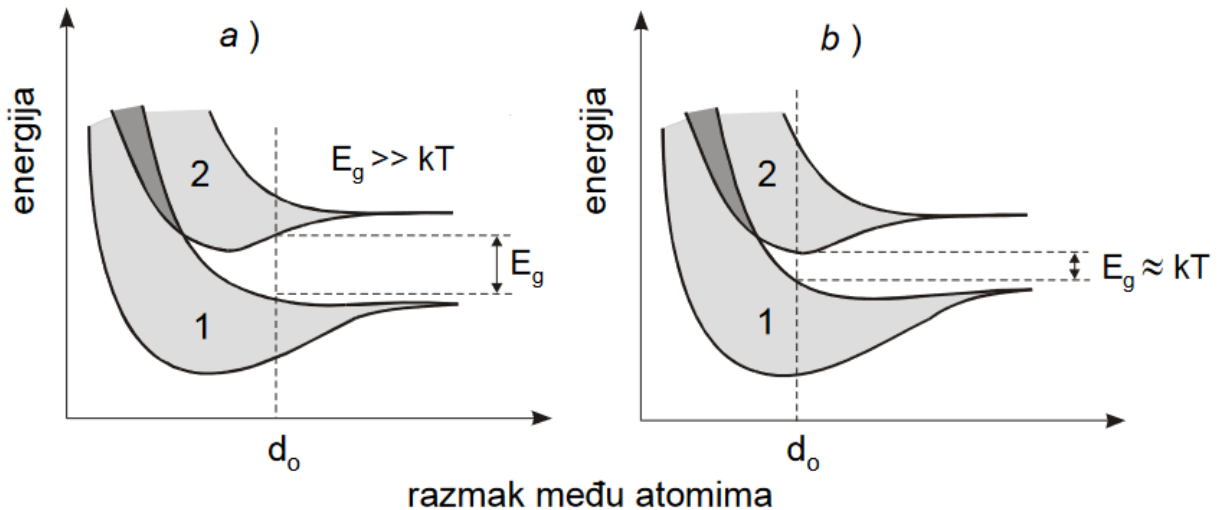
(npr. natrij) imaju jedan valentni elektron, a odgovarajuća vrpca u čvrstom kristalu natrija s  $N$  nivoa bit će popunjena elektronima samo do polovine. Magnezij bi, nasuprot natriju, trebao biti izolator jer ima 2 elektrona u valentnoj vrpci, ali nije jer se vanjske vrpce preklapaju. <sup>[6][7]</sup>



Slika 7. Elektronska struktura metala: preklapanje valentne vrpce popunjene elektronima (1) i prazne vodljive vrpce (2) na razmaku među atomima  $d_0$ .<sup>[6]</sup>

Kada se radi o materijalu kod kojeg, pri ravnotežnom razmaku među atomima  $d_0$  koji odgovara konstanti rešetke materijala, ne dolazi do preklapanja valentne i vodljive vrpce, a valentna vrpca je potpuno zaposjednuta elektronima, onda se mogu razlikovati dva granična slučaja prikazana na slici 8. U oba slučaja elektroni iz popunjene valentne vrpce moraju prijeći u nepopunjenu vodljivu vrpcu da bi mogli sudjelovati u vođenju struje. Taj prijelaz može se postići termičkom aktivacijom elektrona, tj. zagrijavanjem materijala. Ako je energijska razlika između vodljive i valentne vrpce daleko veća od termičke energije elektrona ( $E_g \gg kT$ ), onda je na običnoj temperaturi vjerojatnost prijelaza elektrona iz popunjene valentne u praznu vodljivu vrpcu vrlo mala, stoga nema pokretnih elektrona niti u jednoj vrpci. Takav materijal se ponaša kao izolator. Na sobnoj temperaturi u izolatorima neće biti elektrona u vodljivoj vrpci jer je  $E_g$  velik, pa termička ekscitacija nije moguća što je prikazano na slici 8.(a). Ako širina zabranjene zone odgovara termičkoj energiji elektrona ( $E_g \approx kT$ ), može se očekivati značajan broj termički aktiviranih elektrona u vodljivoj vrpci na običnoj temperaturi. Prijelaz elektrona iz popunjene valentne u nepopunjenu vodljivu vrpcu ostavlja prazna mjesta, tj. šupljine (engl. holes) u valentnoj vrpci u koje elektron može doći s drugog energijskog mjesta u vrpci ostavljajući za

sobom ponovo prazno mjesto; dakle dolazi do pomicanja pozitivno nabijenog praznog mjesta (šupljine), što je ekvivalentno pomicanju elektrona u suprotnom smjeru. Materijal opisane elektronske strukture ponaša se kao poluvodič što je prikazano na slici 8.(b) <sup>[6]</sup>



Slika 8. Nastajanje elektronskih vrpca: Izolator (a) i poluvodič (b); 1 - popunjena elektronima valentna i 2 - prazna vodljiva vrpca. <sup>[6]</sup>

Iz ovoga možemo izvesti zaključak koji ilustrira sljedeća slika: prema energijskoj strukturi čvrstih tijela prema električnoj vodljivosti ona mogu biti izolatori, poluvodiči i metali (slika 10). Fizikalna situacija prikazana na slici 10. postoji samo na temperaturi apsolutne nule. Kod viših temperatura termička pobuda uzrokovat će to da elektroni mogu dobiti dovoljno energije i prijeći u viša energetska stanja. Govorimo o ekscitaciji elektrona u gornju energijsku vrpcu. Elektroni s tim energijama mogu sudjelovati u vođenju električne struje, pa odatle gornjoj energijskoj vrpca naziv vodljiva vrpca. <sup>[6]</sup>

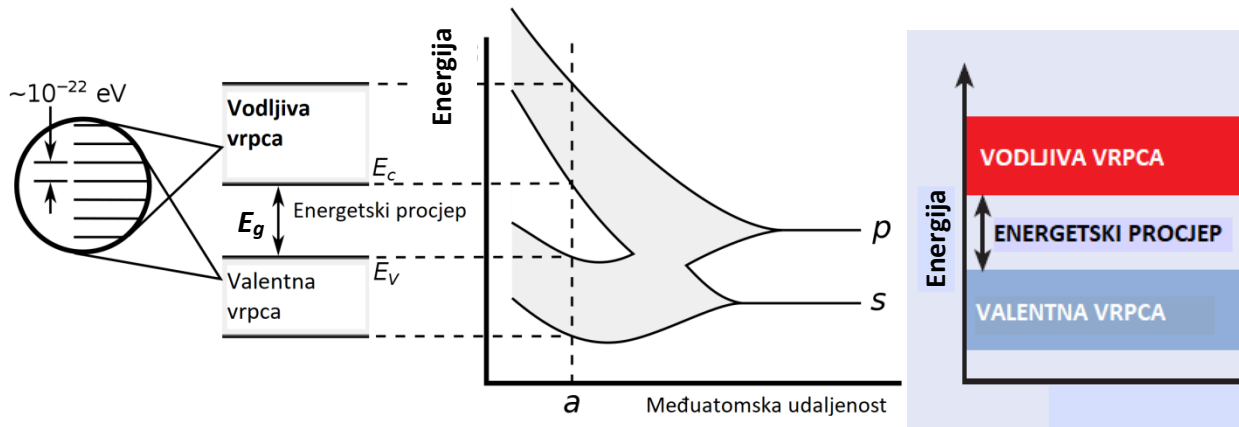
Elektroni izoliranog atoma okupiraju atomske orbitale sa diskretnim energetske razine. Kada atomi formiraju njihove se atomske orbitale preklapaju. Paulijev princip isključenja onemogućava da dva elektrona imaju iste kvantne brojeve u molekuli, pa se prilikom spajanja atoma u molekulu atomske orbitale razdvajaju u dvije molekulske orbitale različite energije. Na taj način elektroni zauzimaju nove energetske razine u kojima će imati različitu energiju. Slično tome, ako se velik broj  $N$  identičnih atoma spoji u krutinu kao što je kristalna rešetka, doći će do

preklapanja atomskih orbitala. Ovdje također vrijedi Paulijev princip isključenja pa se atomske orbitale razdvajaju u  $N$  diskretnih molekulskih orbitala, od kojih svaka ima drugačiju energiju. Pošto je broj atoma te pripadajućih atomskih orbitala velik, te su im vrijednosti energija bliske, energetska stanja možemo smatrati kontinuiranima. Teorija vrpca nam omogućuje opis mnogih svojstava kristala pomoću vrpčaste energetske strukture. Ona opisuje elektronske razine u kristalnim sustavima, karakterizirane Blochovim vektorom  $k$  i brojem vrpce  $n$ . Blochov vektor se opisuje jedinicom  $1/duljina$ , a energija elektrona  $E_n(k)$  kao kontinuirana funkcija vektora  $k$ . Proračuni vrpčaste strukture iskorištavaju periodičnu prirodu kristalne rešetke i njenu simetriju. Kada se rješi Schrödingerova jednačba za jedan elektron u periodičkom potencijalu rešetke, dobivaju se Blochovi valovi kao rješenja: <sup>[1][3][4][5]</sup>

$$\Psi_{n,k}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,k}(\mathbf{r}) \quad (14)$$

Prema Blochovom teoremu, elektrone u kristalu opisuje pomoću valnih funkcija, koje su svojstvene funkcije energije. Svaka je od tih valnih funkcija Blochov val (14), gdje  $u_{n,k}$  ima periodičnost kristalne rešetke. <sup>[5]</sup>

Za svaku vrijednost  $k$  postoji više rješenja Schrödingerove jednačbe označenih s brojem vrpce  $n$ . Svaka se od tih energetske razine blago mijenja s promjenom  $k$  i tako formira glatku vrpcu stanja. Vanjski tj. valentni elektroni atoma su zaduženi za formiranje elektronske vrpce. Oni su također odgovorni za stvaranje kemijskih veza i električnu vodljivost materije. Elektroni koji su bliski jezgri, unutarnji elektroni, ne preklapaju se u tolikoj mjeri koliko i vanjski elektroni koji su zaduženi za stvaranje veza pa su i njihove vrpce uže od vrpce vanjskih elektrona. Općenito vrpce dolaze u različitim širinama u ovisnosti o stupnju preklapanja atomskih orbitala iz kojih nastaju pa se tako može dogoditi da dvije susjedne vrpce ne budu dovoljno široke da pokriju cijeli raspon energije, a ta područja između vrpce nazivaju se energetske procjepima ( $E_g$ ). Kod orbitala unutarnjih elektrona atoma nema velikih preklapanja pa će rezultirajuće vrpce biti uske i sadržavati će velike energetske procjepe. Orbitale vanjskih elektrona su veće i one većinom stupaju u interakciju sa orbitalama drugih atoma što dovodi do većeg stupnja preklapanja vrpce što ih čini širimima, a energetske procjepi se smanjuju ili nisu prisutni. <sup>[1][3][4][5]</sup>



Slika 9. Primjer strukture elektronske vrpce (a) i najjednostavniji prikaz izolatorskog stanja (b).

Izolatori imaju energetski procjep ( $E_g$ ) koji razdvaja osnovno stanje od svih pobuđenih stanja te elektroni ne mogu preskakati iz valentne u vodljivu vrpcu jer im je energija manja od energije procjeka (slika 9.). Kada se izolatori sagledaju sa topološkog gledišta, oni su jednaki ako se mogu promijeniti jedan u drugog mijenjanjem Hamiltonijana tako da sustav uvijek bude u osnovnom stanju. Takav proces je moguć ako postoji određen energetski procjep koji određuje koliko spor adijabatski proces mora biti. Izolatori će tako biti topološki ekvivalentni ako postoji adijabatski način povezivanja pri kojemu energetski procjep ostaje konačan. Spajanje topološki neekvivalentnih izolatora nužno uključuje fazni prijelaz do kojeg dolazi zbog nestajanja energetskog procjeka tj. dolazi na vrijednost nule.<sup>[1][3]</sup> Prisutstvo energetskog procjeka nam govori da određeno stanje ostaje topološki ekvivalentno kada postoje interakcije konačne snage. Može se pretpostaviti da se to stanje može adijabatski povezati sa elektronima koji nisu u interakciji te topološki klasificirati strukture vrpce te uvidjeti da li se topološke raznolikosti pronađene unutar teorije vrpca mijenjaju uvođenjem interakcija ili ne. Ako pretpostavimo da je materijal kristaliničan, možemo iskoristiti translacijsku simetriju za karakterizaciju. Translacijska simetrija omogućava označavanje jednočestičnih stanja pomoću njihovog momenta ( $k$ ). Prema Blochovom teoremu, može se pisati:<sup>[1][3]</sup>

$$|\psi(\mathbf{k})\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u(\mathbf{k})\rangle \quad (15)$$

gdje  $u(k)$  predstavlja periodičko svojstveno stanje ćelije (engl. eigenstate), za Blochov Hamiltonijan: <sup>[1][3]</sup>

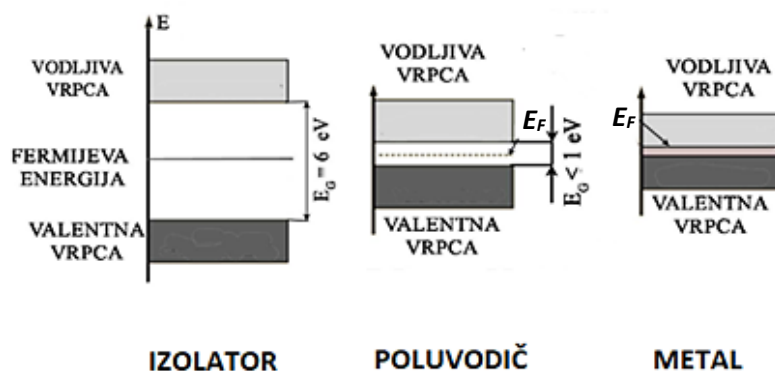
$$H(k) = e^{i kr} H e^{-i kr} \quad (16)$$

$H(k)$  ili ekvivalentne svojstvene veličine (engl. eigenvalues)  $E_n(k)$  i svojstveni vektori  $u_n(k)$  (engl. eigenvectors) definiraju strukturu vrpce. Struktura vrpce izolatora izgleda tako da ima energetski procjep koji razdvaja najvišu popunjenu vrpcu tj. orbitalu (HOMO – engl. Highest occupied molecular orbital) od najniže prazne orbitale (LUMO – engl. Lowest unoccupied molecular orbital). Translacijska simetrija rešetke podrazumijeva da je  $H(k + G) = H(k)$  za recipročne vektore rešetke ( $G$ ). Iz toga proizlazi da je kristalni moment definiran prema prvoj Brillouinovoj zoni kao  $k \equiv k+G$ , koja ima topologiju torusa  $T_d$  u  $d$  dimenzija. Zbog toga se struktura vrpce izolatora može promatrati kao preslikavanje torusa iz Brillouinove zone u prostor Blochovih Hamiltonijana s energetskim procjepom. <sup>[1][3]</sup>

Jedan od glavnih predmeta kojima se topološka teorija vrpca bavi je klasifikacija topološki različitih Hamiltonijana  $H(k)$ , iz čega proizlazi i klasifikacija karakterističnih elektronskih faza. Najbitnija posljedica ove pojave se događa kada imamo prostorno sučelje između dvije topološki različite, tj. karakteristične faze. Ako zamislimo sučelje gdje se dolazi do interpolacije kristala kao funkcije udaljenosti ( $y$ ) između dvije topološki različite faze. Negdje uzduž tog sučelja tj. prostora, energetski procjep mora doći na nulu jer bi inače dvije faze bile jednake. Iz toga proizlazi da će na mjestima gdje energetski procjep prolazi kroz nulu, posljedično postojati elektronska stanja niske energije. <sup>[1][3]</sup>

Osim karakterizacije Hamiltonijana, topološka teorija vrpca nastoji karakterizirati i stanja bez energetskog procjeka (engl. gapless states). Ta stanja se također mogu klasificirati topološki te se ponašaju po određenom principu, volumno-rubnoj korespondenciji (engl. Bulk-boundary correspondence) koja povezuje rubna stanja tj. rubne topološke invarijante sa volumnim topološkim invarijantama. <sup>[1]</sup>

Jedan od načina vizualizacije vrpčaste structure je graf površine konstantne energije koji pokazuje energetska stanja određene energije. Površina stanja sa energijom jednakom Fermijevom, poznata je kao Fermijeva površina. Fermijeva energija ( $E_F$ ) je vrlo bitno svojstvo u određivanju elektronske strukture i ponašanja materije. Prema poziciji Fermijeve energije u odnosu na same elektronske vrpce, može se odrediti kako se materija ponaša te se tako prema strukturi elektronske vrpce materija može podijeliti na izolatore, poluvodiče i metale.

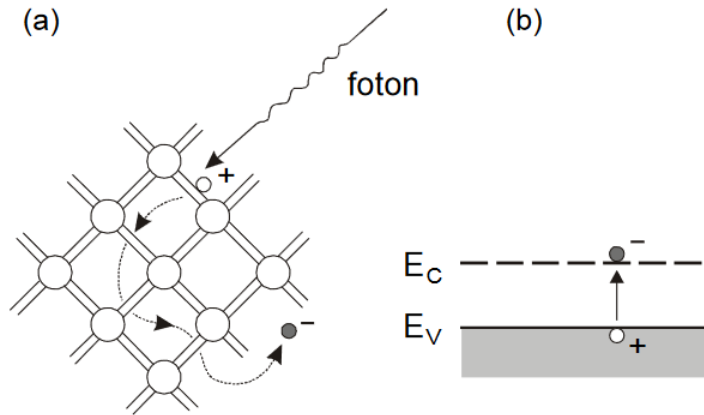


Slika 10. Prikaz strukture elektronskih vrpca i Fermijevih energija za različite materijale.<sup>[7]</sup>

Da li je materijal izolator, poluvodič ili vodič tj. metal, ovisi o broju elektrona u vodljivoj vrpci, odnosno o položaju Fermijeve energije (slika 10.). Kod izolatora postoji velik energetski procjep između valentne i vodljive vrpce ( $E_g = 3 - 6$  eV), pa je broj elektrona u vodljivoj vrpci na sobnoj temperaturi vrlo mali, dok na  $T=0$  K nemamo elektrona u valentnoj vrpci. Kod poluvodiča postoji mali energetski procjep ( $E_g = 0.1 - 2$  eV) pa je na sobnoj temperaturi gustoća elektrona (šupljina) u vodljivoj (valentnoj) vrpci reda veličine  $10^{16} \text{ m}^{-3}$ . Dopiranjem se ta koncentracija može povećati na  $10^{23} \text{ m}^{-3}$ . Ako su sva stanja u vrpci zaposjednuta, elektroni u njoj ne mogu voditi struju jer djelovanjem vanjskog električnog polja mijenja se valni vektor elektrona  $k$ . No u popunjenoj vrpci nema slobodnih stanja u koje bi elektroni mogli prijeći, pa nema ni struje.<sup>[7]</sup>

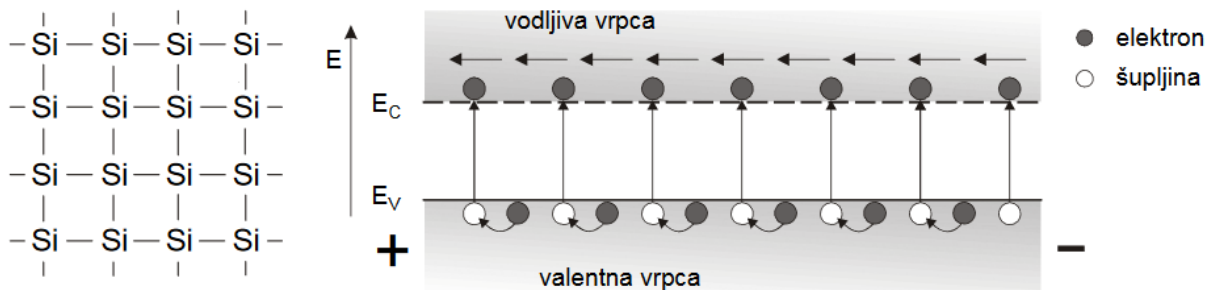
Ukoliko se Fermijeva energija nalazi unutar vrpce, tj. preciznije na mjestu preklapanja vodljive i valentne vrpce, materija posjeduje metalno ponašanje. Drugi slučaj je kada se Fermijeva energija nalazi unutar energetskog procjepa između najviše popunjene vrpce i najniže nepopunjene vrpce, te onda govorimo o izolatorskom ili poluvodičkom ponašanju. Razlika između izolatora i poluvodiča je u veličini energetskog procjepa. Kod izolatora imamo puno veći energetski procjep, te oni ne provode električnu struju jer je energija elektrona valentne vrpce manja od energije procjepa pa se ne događa prijelaz elektrona u vodljivu vrpcu koja je zadužena za električnu vodljivost. Kod poluvodiča, iako postoji energetski procjep, energija procjepa je puno manja u odnosu na izolatorsko stanje te je elektronima moguć prelazak iz valentne u vodljivu vrpcu. Dok je promjena Fermijeve energije zanemariva za metale, kod poluvodiča dodatni elektron okupira vodljivu vrpcu, dok zamjena s atomom manjeg naboja dovodi do pojave šupljine u valentnoj vrpci, koja također sudjeluje u električnom transportu. <sup>[1][5]</sup>

Osnovna ideja u teoriji poluvodiča je da elektroni mogu biti nosioci struje odnosno naboja na dva potpuno različita načina: prvi način je nazvan "vodljivost viškom elektrona" ili jednostavno elektronska vodljivost; drugi način je "defektna vodljivost" ili vodljivost šupljinama. Ta dva načina vodljivosti mogu biti istovremeno prisutna, a mogu biti i odvojeno aktivna. Kvantno-mehaničko objašnjenje nalazimo u energetskoj strukturi, odnosno u postojanju energijskih zona dopuštenih i nedopuštenih stanja. C, Si, Ge pripadaju IV. grupi elemenata i zovu se kovalentni kristali. Atome na okupu drže veze elektronskih parova koje čine sparni valentni elektroni. Vodljivost u kovalentnim poluvodičima može biti proizvedena na razne načine. U biti, vodljivost je uvijek posljedica nepravilnosti u inače savršenoj strukturi. Slika 11. (a) pokazuje jedan način na koji poluvodič postaje vodljiv: foton visoke energije predaje energiju elektronu, a on se oslobađa veze. Izbačeni elektron ne može se smjestiti niti u jednu drugu vezu jer su sve popunjene i kao takav "luta" po prostoru među atomima (isprekidana strelica). On predstavlja višak negativnog naboja na jednom mjestu i zovemo ga elektron u višku. Elektron u višku kreće se po kristalu zbog termičke pobude, ali ukoliko se narine vanjsko električno polje, to gibanje neće biti kaotično, nego usmjereno. Poluvodičem tada teče električna struja. Na slici 11. (b), ekscitirani elektron predstavljen je elektronom u vodljivoj vrpci. Praznom mjestu u kovalentnoj vezi kristala odgovara lokalizirani pozitivni naboj, kojeg zovemo šupljinom. <sup>[6]</sup>



Slika 11. Skica nastajanja nosilaca naboja i vodljivosti u intrinzičnom poluvodiču: a) foton visoke energije  $h\nu > E_g$  predaje energiju elektronu u kovalentnoj vezi, b) oslobođeni elektron u vodljivoj vrpci i pozitivna šupljina u valentnoj vrpci. [6]

Elektron iz susjedne valentne veze može skočiti u to prazno mjesto, pa izgleda kao da se šupljina giba po kristalu. Ako je električno polje nula, gibanje šupljine je kaotično, dok je za električna polja različita od nule gibanje usmjereno (slika 12.). Ako u inače punoj valentnoj vrpci nedostaje elektron, kažemo da se tu pojavila jedna šupljina. Taj proces nazivamo generacijom parova elektron-šupljina i prikazan je na slici 12. (b). Prestanemo li osvjetljivati poluvodič, dolazi do rekombinacije elektron-šupljina parova: pri kaotičnom gibanju elektron će naići na prazno mjesto u valentnoj vrpci. Popunjavajući tu vezu prestaje biti pokretan, a istovremeno nestaje i šupljina. [6]



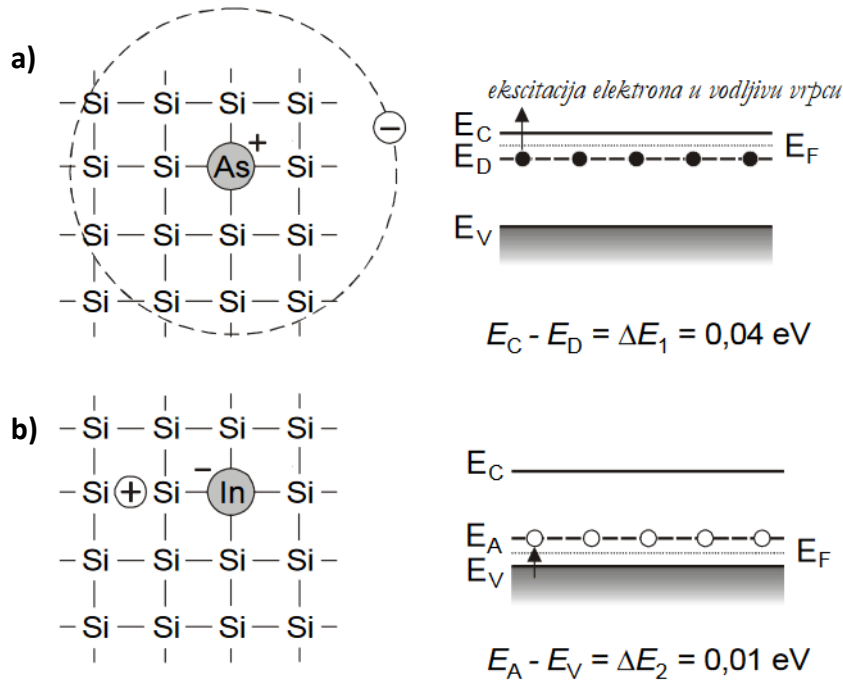
Slika 12. Skica kristalne rešetke i električne vodljivosti intrinzičnog poluvodiča u električnom polju. [6]



Na slici 12. vidi se još i to da energija elektrona koji sudjeluju u vodljivosti odgovara energijama pri dnu vodljive vrpce, dok energije šupljina koje sudjeluju u vodljivosti odgovaraju vrhu valentne veze. Jednostavnije rečeno, elektroni se nalaze na dnu vodljive, a šupljine na vrhu valentne zone. Na osnovi kvantne mehanike može se pokazati da postoji velika simetrija u ponašanju elektrona i šupljina u poluvodičima, samo što su šupljine nešto slabije pokretne nego elektroni. Vodljivost tog tipa zove se intrinzična ili vlastita vodljivost. Broj elektrona i šupljina koji sudjeluju u vodljivosti je jednak. Od tud tim poluvodičima naziv intrinzični poluvodiči ili unutrašnji poluvodiči. [6]

Defekti su bitan uzrok vodljivosti poluvodiča. Takav su defekt i primjese. Primjese su strani atomi ugrađeni u kristalnu rešetku poluvodiča. Primjese se dodaju rastaljenoj masi za vrijeme umjetnog stvaranja monokristala. Mogu se ugraditi u kristalnu rešetku na mjesto jednog atoma, to su zamjenski ili supstitucijski atomi, ili između dva atoma, to su međuprostorni ili intersticijski atomi. Za svojstva germanija i silicija važne su primjese 15. i 13. grupe periodnog sustava, dakle elementi koji imaju jedan valentni elektron više ili manje od njih. U kojoj mjeri primjese utječu na svojstva poluvodiča vidimo iz činjenice da 1 atom bora dodan na  $10^5$  atoma silicija povećava vodljivost Si-kristala tisuću puta. Primjese treće i pete grupe su supstitucijski atomi, što je eksperimentalno dokazano pomoću X-zraka. Ako se poluvodiču dodaju arsenovi atomi na taj način se izvjestan broj atoma silicija (ili germanija) zamijeni arsenovim atomima, koji u vanjskoj elektronskoj ljusci ( $4s^2 4p^3$ ) imaju jedan valentni elektron više od silicija. Četiri arsenova elektrona tvore kovalentnu vezu sa susjednim silicijevim atomima, što je prikazano na slici 13., dok peti arsenov elektron ostaje slobodan, predstavljajući lokalizirani ali pokretan negativni naboj. Neutralnost je i dalje sačuvana, ali je taj elektron slabije vezan za svoj atom od elektrona u kovalentnoj vezi. Njegova energija je znatno veća, ali ipak niža od  $E_C$  i stoga je potrebna mala energija da prijeđe u vodljivu vrpcu kristalne rešetke silicija. Time je arsenov atom postao donor elektrona, odnosno donorska primjesa, a silicij je postao poluvodič n-tipa (tj. negativan tip zbog viška elektrona donorskog tipa). Simbolički se taj proces može opisati kao:  $D^0 \rightarrow D^+ + e$ , tj. električki neutralni donor  $D^0$  daje pozitivni ion  $D^+$ , koji predstavlja lokalizirani pozitivni nepokretni naboj i elektron. Atomi primjese su tako udaljeni da je njihovo međusobno djelovanje zanemarivo. Njima dakle pripada samo jedan energijski nivo, a ne vrpca. Položaj toga

novog donorskog nivoa  $E_D$  u zabranjenoj zoni ima velik utjecaj na električnu vodljivost poluvodičkog kristala. Za razmatrani slučaj nivo je donora samo 0,04 eV ispod vodljive vrpce (energija aktivacije,  $\Delta E_1 = 0,04$  eV). Fermijev nivo nalazi se na polovini između donorskog nivoa  $E_D$  i donjeg ruba vodljive vrpce  $E_C$ . Drugi je slučaj mehanizma povećanja električne vodljivosti intrinzičnog Si zamjena atoma Si atomima nekog elementa trinaeste skupine, kao na primjer atom indija na slici 13.(b). Atom indija u vanjskoj elektronskoj ljusci ( $5s^2 5p^1$ ) ima jedan valentni elektron manje od silicija i jedna od atomskih orbitala je prazna. Stoga atom indija tvori kovalentnu vezu s četiri susjedna silicijeva atoma angažiranjem svoja tri elektrona, a četvrta veza nastaje prijelazom jednog elektrona sa silicijevog atoma u praznu orbitalu atoma indija, koji postaje negativno nabijen. Gubitkom valentnog elektrona u valentnoj vrpici silicija nastaju pozitivne "šupljine", odnosno slobodni energijski nivo. To omogućava valentnim elektronima da pod utjecajem vanjskog električnog polja prelaze u šupljine (oslobođene energijske nivoe), čime znatno poraste električna vodljivost poluvodiča. Lokalizirani pokretni pozitivni naboj, kojeg nazivamo "šupljinom" nastaje i na drugim mjestima tako da elektroni iz drugih kovalentnih veza uskaču u prazni kovalentnu vezu uz indijev atom, koji tada predstavlja lokalizirani negativni nepokretni naboj. Električna vodljivost poluvodiča u ovom slučaju temelji se na putovanju pozitivno nabijenih šupljina u smjeru suprotnom od smjera gibanja elektrona pod utjecajem vanjskog električnog polja. Primanjem elektrona od silicijevog atoma, indijev atom je postao akceptor elektrona, odnosno akceptorska primjesa, a silicij je postao poluvodič p-tipa. Simbolički se taj proces može opisati kao:  $A^\circ \rightarrow A^- + h^+$ , tj. električni neutralni akceptor  $A^\circ$  daje negativni ion  $A^-$  i šupljinu  $h^+$ . Energijski nivo akceptorskog atoma nešto je viši od gornjeg ruba valentne vrpce. Za ovaj slučaj ta udaljenost iznosi 0,01 eV (energija aktivacije,  $\Delta E_2 = 0,01$  eV). Naravno da zbog toga elektroni iz kovalentnih veza valentne vrpce mogu lako prijeći u akceptorski energijski nivo  $E_A$  u valentnoj vrpici, koji omogućuju povećanu vodljivost poluvodiča p-tipa. Za poluvodič p-tipa Fermijev nivo nalazi se na polovini između gornjeg ruba valentne vrpce  $E_V$  i akceptorskog nivoa  $E_A$ .<sup>[6]</sup>



Slika 13. Skica kristalne rešetke i elektronskih vrpca za: a) n-tip Si (ekscitacija elektrona s donorskog nivoa  $E_D$  u vodljivu vrpcu) i b) p-tip Si (ekscitacija elektrona u akceptorski nivo  $E_A$ ).<sup>[6]</sup>

### 2.5.3. BERRYJEVA FAZA

Koncept Berijeve faze igra jednu od ključnih uloga u topološkoj teoriji vrpca. Otkriće Berijeve faze je povezano uz ideju da kvantni adijabatski transport čestica u sporo promjenjivim poljima (pr. električnim, magnetnim) može utjecati na valnu funkciju. Berijeva faza proizlazi iz dvofazne prirode kvantno-mehaničkih valnih funkcija. Unatoč transformacijama, Blochova stanja ostaju invarijante.<sup>[1][3]</sup>

$$|u(\mathbf{k})\rangle \rightarrow e^{i\phi(\mathbf{k})}|u(\mathbf{k})\rangle \quad (17)$$

Ova transformacija podsjeća na elektromagnetske transformacije pa iz toga proizlazi definicija Berijeve veze:<sup>[1][3]</sup>

$$\mathbf{A} = -i\langle u(\mathbf{k})|\nabla_{\mathbf{k}}|u(\mathbf{k})\rangle \quad (18)$$

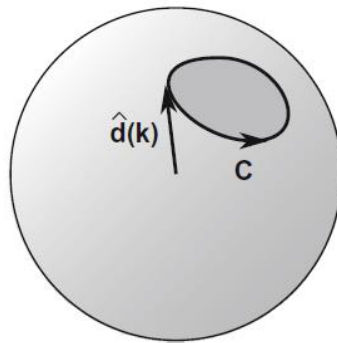
Gdje je  $\mathbf{A}$  je slično elektromagnetskom vektorskom potencijalu. Kada se uvrsti u jednadžbu (17), dobiva se: <sup>[1][3]</sup>

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla_{\mathbf{k}}\phi(\mathbf{k}) \quad (19)$$

Iako  $\mathbf{A}$  nije mjerodavna invarijantna, može se povući analogija sa magnetskim fluksom. Za bilo koju zatvorenu petlju  $C$  u  $\mathbf{k}$  prostoru, možemo definirati Berrijevu fazu kao: <sup>[1][3]</sup>

$$\gamma_C = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{k} = \int_S \mathcal{F} d^2\mathbf{k} \quad (20)$$

Gdje  $\mathcal{F} = \nabla \times \mathbf{A}$  definira Berrijevu zakrivljenost, koja se može promatrati kao krivulja slična Gaussovoj. Radi jednostavnosti, pretpostavit ćemo da je  $\mathbf{k}$  dvodimenzionalni prostor. <sup>[1]</sup>



Slika 14. Berrijeva faza u teoriji vrpca za dvije vrpce je definirana polovicom čvrstog kuta prekrivenog sa  $\hat{d}(\mathbf{k})$ . <sup>[1]</sup>

Berrijeva faza se primjenjuje u mnogo područja fizike te opisuje faznu promjenu pod utjecajem adijabatskog ciklusa. U ovom poglavlju, koristit ćemo Berrijevu fazu za klasifikaciju petlji u prostoru te će dobiti fizikalno značenje. Korisno je krenuti sa razumijevanjem Berrijeve faze za najjednostavniji Hamiltonijan sa dvije razine, koji se može opisati pomoću Paulijevih matrica  $\sigma$  kao: <sup>[1][3][9][8]</sup>

$$H(\mathbf{k}) = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} d_z & d_x - id_y \\ d_x + id_y & -d_z \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Ovaj Hamiltonijan ima jedinstvene vrijednosti (eigenvrijednosti)  $\pm |d|$  koje ovise samo o jediničnom vektoru  $\hat{d} = d/|d|$ .  $\hat{d}$  se može promatrati kao određena točka na sferi  $S^2$ . Rezultat kojeg je dobio Berry pokazuje da je za petlju  $C$ , faza povezana sa osnovnim stanjem, a dobivena iz (19) i (20), sljedeća: <sup>[1][3][9][8]</sup>

$$\gamma C = 1/2 \quad (22)$$

Kada  $C$  odgovara  $2\pi$  rotaciji  $\hat{d}$  na ravnini, Berrijeva faza je  $\pi$ . Berrijeva zakrivljenost je definirana preko broja čvrstih kuteva u  $k$  prostoru, što se jednostavnije može prikazati kao polovica čvrstog kuta za preslikavanje  $\hat{d}(k)$ . <sup>[1][3][9][8]</sup>

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2} \epsilon_{ij} \hat{\mathbf{d}} \cdot (\partial_i \hat{\mathbf{d}} \times \partial_j \hat{\mathbf{d}}). \quad (23)$$

Jako bitna činjenica koja proizlazi iz (23) je da ako integriramo Berrijevu zakrivljenost nad zatvorenim 2D prostorom, kao što je Brillouinova zona  $T^2$ , dobivamo višekratnik  $2\pi$  koji je jednak broju namotaja  $\hat{d}(k)$  oko sfere kao funkcija od  $k$ . Iz ovoga se može definirati topološka invarijanta Chernov broj, koji se za zatvorene površine  $S$ , može izraziti kao: <sup>[1][3][9][8]</sup>

$$n = \frac{1}{2\pi} \int_S \mathcal{F} d^2 \mathbf{k}. \quad (24)$$

Kvantizacija Chernovog broja je općenitija od modela dviju vrpca te govori da je za petlju  $C$  na zatvorenoj površini, unutrašnjost petlje  $C$  u (20) proizvoljna, tako da se integrali površine nad unutrašnjosti i vanjskog dijela petlje moraju slagati prema višekratniku  $2\pi$ . Iz toga proizlazi da integral Berrijeve zakrivljenosti nad cijelom površinom mora biti  $2\pi n$ . Ova kvantizacija je usko povezana sa kvantizacijom Diracovog magnetskog monopola. <sup>[1][3][9][8]</sup>

#### **2.5.4. TOPOLOGIJA U JEDNOJ DIMENZIJU (1D)**

U ovom poglavlju govorit ćemo o najjednostavnijem prikazu topološke teorije vrpca, koji se manifestira u jednoj dimenziji. Preko nekoliko ključnih koncepata, kao što su električna polarizacija, Chernov broj i topološki zaštićena rubna stanja, uvest ćemo SSH model koji daje jednostavnu teoriju koja uključuje prethodne koncepte. <sup>[1]</sup>

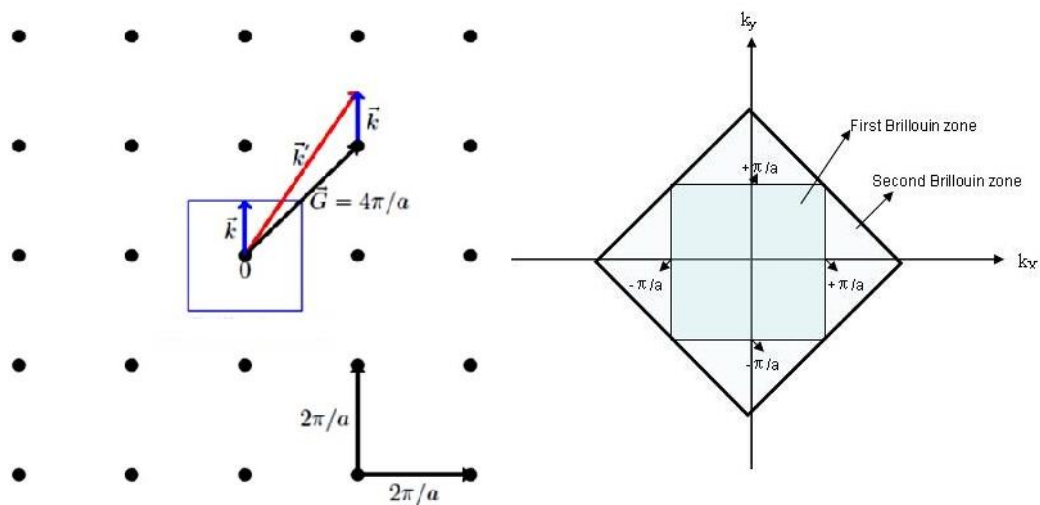
U elementarnoj elektrostatici, električna polarizacija  $P$  je definirana kao dipolni moment po jedinici volumena. Polarizacija vodi do graničnih naboja u volumenu tvari,  $\rho_b = -\nabla \cdot P$ , i na površini,  $\sigma_b = P \cdot \hat{n}$ . U jednoj dimenziji, polarizacija je vezana uz naboj na krajevima: [1]

$$Q_{\text{end}} = P. \quad (25)$$

Kako bi se odredila polarizacija iz 1D strukture vrpce, mora se naći rješenje problema, koji nije beznačajan, jer je struktura vrpce obično definirana preko sustava sa periodičkim rubnim uvjetima pa je  $Q_{\text{end}}$  nepristupačan. Rješenje proizlazi iz teorije feroelektričnosti te daje mogućnost primjene Berrijeve faze. Jednodimenzionalna polarizacija je Berrijeva faza okupiranih Blochovih valnih funkcija oko 1D Brillouinove zone, a integral nad 1D Brillouinovom zonom je ekvivalentan krugu  $S^1$ . [1]

$$P = \frac{e}{2\pi} \oint_{BZ} A(k) dk. \quad (25)$$

Brillouinova zona je zapravo jedinstveno definirana primitivna ćelija u recipročnom prostoru. Na isti način kako je Bravaisova rešetka podijeljena na Wigner-Seitzove ćelije u realnom prostoru, tako se recipročna rešetka dijeli na Brillouinove zone. Granice ove rešetke su dane ravninama recipročne rešetke. [1]



Slika 15. Prikaz recipročnog prostora i Brillouinove zone.

Važnost Brillouinove zone proizlazi iz opisa valova pomoću Blochovih valova u periodičkom sustavu gdje se rješenja mogu opisati pomoću ponašanja u prvoj Brillouinovoj zoni.  $Q_{end}$  nije u potpunosti određen jer se određeni broj naboja može dodati ili oduzeti na krajevima bez da se mijenja masa tvari. Iz toga proizlazi da  $Q_{end}=P$  imaju sličnu dvoznačnost kao Berrijeva faza i polarizacija. Kada se primijeni transformacija: <sup>[1]</sup>

$$|u(k)\rangle \rightarrow e^{i\phi(k)}|u(k)\rangle \quad (26)$$

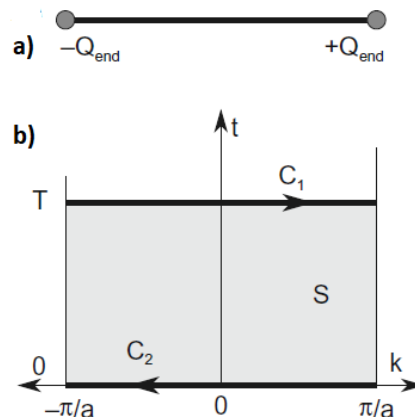
dobivamo:

$$\varphi\left(\frac{\pi}{a}\right) - \varphi\left(-\frac{\pi}{a}\right) = 2\pi n, \quad P \rightarrow P + ne \quad (27)$$

1D Brillouinova zona određuje netrivialne petlje koje nisu granice unutrašnjosti te se na takvim petljama  $\gamma C$  mijenja za  $2\pi n$  lako su Berrijeva faza i polarizacija dvojne do određenog brojnika, promjene u količini su mjerodavne invarijante i dobro su definirane. <sup>[1]</sup> Ako se zamisli da je struktura vrpce funkcija kontrolnog parametra  $t$ , tada je promjena u polarizaciji između  $t=0$  i  $t=T$ :

$$\Delta P = P_{t=T} - P_{t=0} = \frac{e}{2\pi} \left[ \oint_{C_1} - \oint_{C_2} \right] \mathbf{A} \cdot d\mathbf{k} = \frac{e}{2\pi} \int_S \mathcal{F} dk dt. \quad (28)$$

Kao što je prikazano na slici 16., granica unutrašnjosti je  $C_1-C_2$  pa se može primijeniti Stokesov teorem kako bi se izrazio integral u kontekstu Berrijeve zakrivljenosti  $F$ . <sup>[1]</sup>



Slika 16. a) Polarizacija u 1D je određena  $Q_{end}$ . b) Promjena u polarizaciji je opisana promjenom Berrijeve faze na petljama  $C_1$  i  $C_2$ . <sup>[1]</sup>

### 2.5.4.1. CHERNOV BROJ

Chernov broj ( $Q$ ) je definiran preko sume Berrijevih flukseva svih dijelova koji tvore određenu površinu. Za primjer ćemo uzeti površinu zatvorenog torusa:

$$Q = \frac{1}{2\pi} \sum_{nm} F_{nm}. \quad (29)$$

Činjenica da je Chernov broj definiran preko mjerodavne invarijante Berrijevog fluksa, osigurava da je i sam Chernov broj mjerodavna invarijanta. Diskretna formula za Chernov broj nam omogućava da definiramo modificirane Berrijeve flukseve  $F_{nm}$  kao:

$$\tilde{F}_{nm} = \gamma_{(n,m),(n+1,m)} + \gamma_{(n+1,m),(n+1,m+1)} + \gamma_{(n+1,m+1),(n,m+1)} + \gamma_{(n,m+1),(n,m)} \quad (30)$$

Budući da je svaki rub podijeljen između dva susjedna sustava, suma svih modificiranih berrijevih flukseva prelazi u nulu.

$$\sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \tilde{F}_{nm} = 0. \quad (31)$$

Ako je  $-\pi \leq F_{nm} < \pi$ , tada je  $\tilde{F}_{nm} = F_{nm}$ .  $\tilde{F}_{nm}$  se može nalaziti izvan raspona  $[-\pi, \pi)$ , a dodatkom pozitivnog ili negativnog cjelobrojnog višekratnika  $2\pi \in \mathbb{Z}$  ga vraćamo u taj raspon.

$$Q_{nm} = \frac{F_{nm} - \tilde{F}_{nm}}{2\pi} \in \mathbb{Z}. \quad (32)$$

Jednostavan prikaz Chernovog broja ( $Q$ ) kao sume Berrijevih flukseva svih dijelova zatvorene površine, predstavlja broj vrtložnih stanja na površini.

$$Q = \frac{1}{2\pi} \sum_{nm} F_{nm} = \sum_{nm} Q_{nm} \in \mathbb{Z}. \quad (33)$$

Cijeli broj  $n$ , koji na neki način određuje Chernov broj, definira se kao integral  $k$  i  $t$ :

$$n = \frac{1}{2\pi} \int_{T^2} \mathbf{F} dk dt. \quad (34)$$

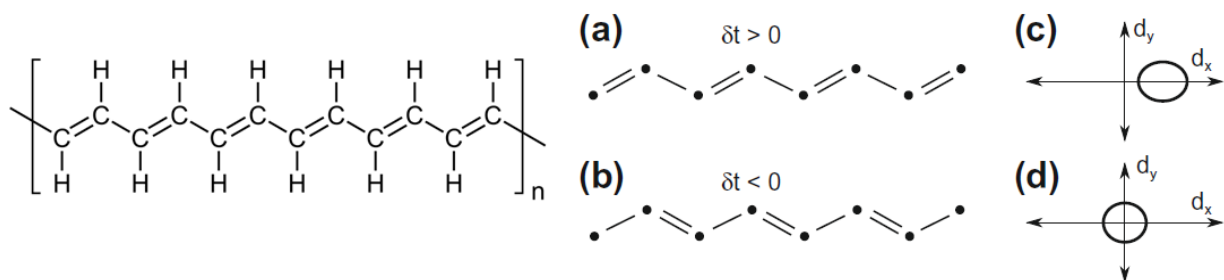


Iz toga se može zaključiti da je skupina 1D topoloških izolatora, definirana preko Hamiltonijana  $H(k,t)$ , klasificirana pomoću Chernovog broja, te da topološka invarijanta opisuje broj kvantiziranih naboja po ciklusu.

#### 2.5.4.2. SSH MODEL (SU – SCHRIEFFER - HEEGER MODEL)

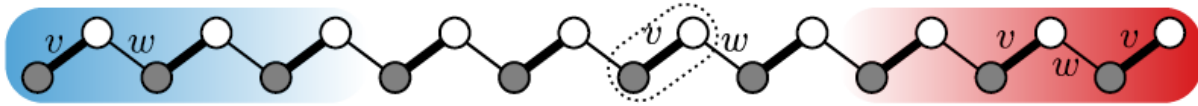
Su – Schrieffer - Heeger model, poznatiji kao SSH model, omogućuje nam shvaćanje osnovnih koncepata topoloških izolatora te opisuje preskakanje fermiona bez spina po 1D kristalnoj rešetki sa raspoređenim amplitudama. Koristeći SSH model, uvodimo koncepte kiralne simetrije, razliku između mase/volumena tvari i krajeva tj. rubova odnosno volumno-rubnu korespondenciju, jednočestičnog Hamiltonijana te topoloških invarijanti. <sup>[1]</sup>

SSH model je uveden kao model vodljivog polimera poliacetilena, kod kojeg u polupopunjenom stanju dolazi do Peierlovih tranzicija, odnosno distorzija, sve do dimeriziranog stanja. Peierlove tranzicije su distorzije u kristalnoj periodičkoj rešetki jednodimenzionalnog kristala gdje pozicije atoma osciliraju te je savršena struktura 1D kristala narušena. Ono što je zanimljivo je da postoje dva različita dimerizirana stanja koja su istovremeno topološki različita, ali i topološki jednaka. Prikaz tih dvaju različitih dimeriziranih stanja može se vidjeti na slici 13. <sup>[1]</sup>



Slika 13. Prikaz strukture i dva različita dimerizirana stanja poliacetilena u SSH modelu (a), (b); (c),(d) Prikaz jediničnog vektora  $\hat{d}(k)$ . <sup>[1]</sup>

Sučelje, odnosno područja između dvaju različitih stanja su povezana sa rubnim stanjima nulte energije. SSH model omogućava opis najjednostavnijeg modela sa dvije vrpce za opis topoloških pojava. Također, SSH model opisuje skakanje elektrona po lancu u 1D rešetki sa raspoređenim amplitudama kako je prikazano na slici 14. <sup>[10]</sup>



Slika 14. Geometrija SSH modela. <sup>[10]</sup>

Kružići na slici 14. predstavljaju mjesta na podrešetci A (bijeli kružići), odnosno B (sivi kružići). Svaki od kružića je zadužen za jedno stanje. Lanac se sastoji od  $N$  jediničnih ćelija od kojih svaka ćelija sadrži po jedno mjesto na podrešetci A i jedno na podrešetci B. Na slici 14. zaokružena je ćelija  $N=6$ , kako bi se pobliže objasnila struktura jedne ćelije. Amplitude su raspoređene na način da je skakanje elektrona unutar ćelije  $v$ , označeno sa debljim linijama, a skakanje elektrona između ćelija  $w$ , označeno sa tanjim linijama. Rubna stanja su označena plavom i crvenom bojom. Interakcije između elektrona se zanemaruju, pa je dinamika svakog zasebnog elektrona opisana jednočestičnim Hamiltonijanom: <sup>[10]</sup>

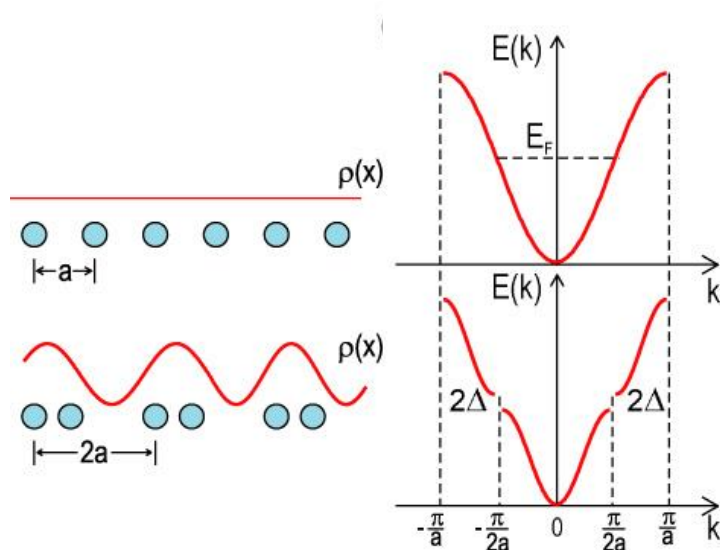
$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^N (|m,B\rangle \langle m,A| + h.c.) + w \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1,A\rangle \langle m,B| + h.c.) \quad (35)$$

Stupanj slobode spina nije prisutan u SSH modelu, budući da ni jedna stavka u gore navedenom Hamiltonijanu ne ovisi o spinu. Iz toga se može zaključiti da SSH model opisuje spin-polarizirane elektrone. Kada se SSH model primijenjuje na realni fizikalni sustav, npr. poliacetilen, moramo uzeti dva slučaja. U ovom poglavlju govorit će se o jednom slučaju koji razmatra čestice koje možemo nazvati fermioni ili elektroni. Fermioni su čestice polucjelobrojnog spina, zbog čega njihovo ponašanje opisuje Fermi-Diracova statistika, te tako i za njih vrijedi Paulijev princip isključenja. Zanima nas dinamika fermiona u i oko osnovnog stanja SSH modela pri uvjetima nulte temperature i nultog kemijskog potencijala, gdje sva jedinstvena stanja (eigenstanja) Hamiltonija sa negativnom energijom, zbog Paulijevog principa isključenja, ne mogu sadržavati više od jednog okupacijskog mjesta. U lancu postoji  $N$  takvih mjesta te se to stanje, karakteristično za najjednostavnije izolatore kao što je poliacetilen, naziva polupopunjeno stanje. U takvoj situaciji, svaki ugljikov atom pridonosi jedan vodljivi elektron pa tako možemo pronaći po jednu česticu oba spina u jednoj jediničnoj ćeliji. Kao i svaki čvrsti sustav, dugi lanac

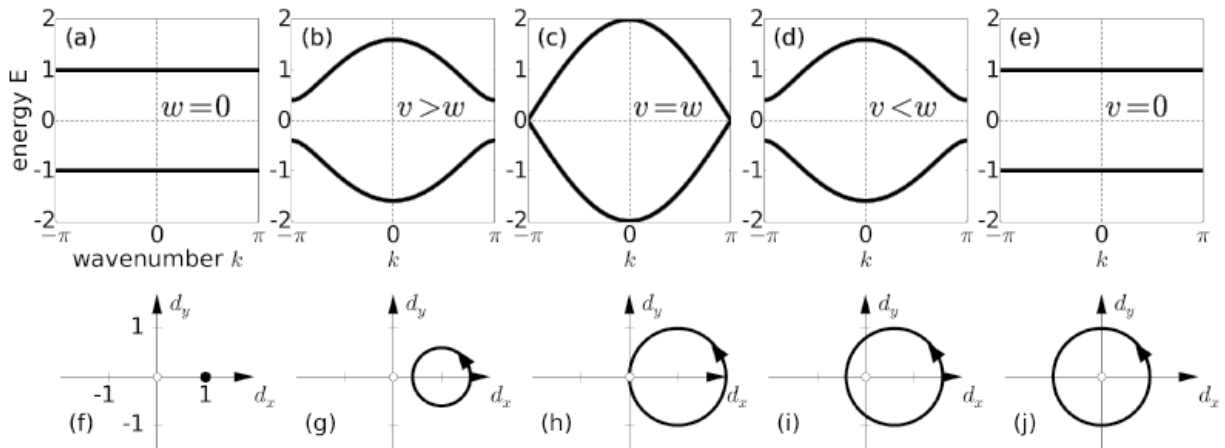
poliacetilena u SSH modelu ima određenu masu tj. volumen stvari (engl. bulk), i krajeve odnosno rubna stanja ili granice. Masa stvari se nalazi u sredini, dok su rubna stanja zapravo rubovi lanca označeni plavom i crvenom bojom na slici 14. Masa stvari ne ovisi o tome kako su definirana rubna stanja. Sve dok su amplitude u poliacetilenu raspoređene na način da se funkcije ne dodiruju ( $v \neq w$ ), kao što je prikazano na slici 16. (a), (b), (c), (d); postoji energetski procjep u dvije dimenzije koju razdvaja donju popunjenu vrpce od prazne gornje vrpce definiran prema: [10]

$$\Delta = \min_k E(k) = |v - w|. \quad (36)$$

Ako se faze preklapaju ( $v = w$ ), kao što je prikazano na slici 15. (c), SSH model opisuje stanje vodiča. U tom slučaju postoje jedinstvena valna stanja (eigenstanja) u masi stvari sa proizvoljno malom energijom, koja mogu prevesti elektrone sa jednog kraja lanca na drugi. [10]

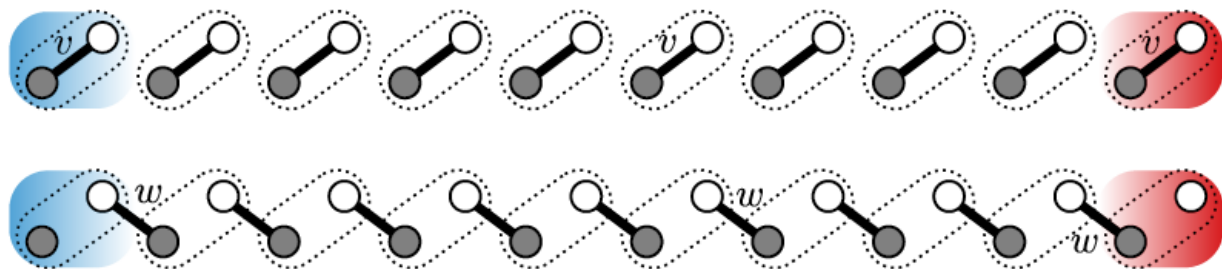


Slika 15. Prikaz strukture i nastanak energetskog procijepa za neprekinuti polimerni lanac te za dimerizirani lanac.



Slika 16. Različiti slučajevi preskakujućih amplituda za SSH model sa pripadajućim vektorom  $d(k)$   
 (a):  $v = 1$ ;  $w = 0$ ; (b):  $v = 1$ ;  $w = 0.6$ ; (c):  $v = w = 1$ ; (d):  $v = 0.6$ ;  $w = 1$ ; (e):  $v = 0$ ;  $w = 1$  <sup>[10]</sup>

Za dva potpuno dimerizirana stanja, SSH model je vrlo jednostavan. Ako amplituda između ćelija nestane, amplituda unutar ćelije će biti 1 ( $v=1$ ,  $w=0$ ) i obratno. U oba se slučaja SSH lanac raspada na sekvence tj. dijelove nepovezanih dimera kako je prikazano na slici 16. <sup>[10]</sup>



Slika 16. Potpuno dimerizirana rubna stanja SSH modela poliacetilena nastala raspadom lanca na nepovezane dimere. <sup>[10]</sup>

Obično nalazimo gornji slučaj sa slike 16. , preskakanje unutar ćelije ( $v = 1$ ,  $w = 0$ ), te je tada svako jedinstveno energetska stanje (eigenstanje) parna ili neparna superpozicija dva mjesta u istoj ćeliji. U topološkom slučaju ( $v = 0$ ,  $w = 1$ ), koji se na slici 16. nalazi dolje i koji predstavlja preskakanje između ćelija, dimeri nastaju između dviju susjednih ćelija te dolazi do stvaranja izoliranog mjesta na rubu. Na svakom rubu nastaje po jedno rubno stanje te oba moraju

sadržavati jedno eigenstanje nulte energije, iz razloga što u lancu nema potencijala. U oba dimerizirana rubna stanja, energetske eigenvrijednosti su neovisne o valnom broju,  $E(k) = 1$ . U takozvanoj granici ravne vrpce, zajednička brzina je nula, što pokazuje da kako se lanac raspada na dimere, unos čestica u masu tvari se neće proširiti na cijeli lanac. Stanja u potpuno dimeriziranom SSH lancu su najjednostavniji primjer topoloških rubnih stanja. <sup>[10][1]</sup>

### 2.5.4.3. SIMETRIJA VREMENSKE INVERZIJE

U fizici kondenzirane materije te općenito fizici materijala, možemo definirati određene diskretne simetrije tvari. Najbitnija diskretna simetrija za topološke izolatore i općenito za eksperimentalno realizirajuće sustave je vremenska inverzija. Vremenska inverzija radi na principu okretanja strelice vremena. <sup>[1][3][8][9]</sup>

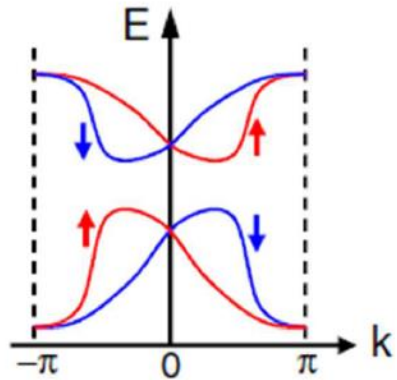
$$T : t \rightarrow -t \quad (37)$$

Simetrija vremenske inverzije (TRS, T-simetrija) je jedno od osnovnih svojstava sustava. Ona upućuje na očuvanje entropije sustava. Prema drugom zakonu termodinamike, entropija sustava raste kako vrijeme prolazi u budućnost, a makroskopski svijet u pravilu ne pokazuje simetriju vremenske inverzije. To nas upućuje na to da je vrijeme nesimetrično osim za neka posebna ravnotežna stanja. Za prikaz ove pojave možemo uzeti česticu u magnetnom polju. Kada se čestica stavi u magnetno polje, dolazi do skretanja njene putanje. Ako se okrene strelica vremena, čestice se neće vratiti istim putem te će sustav prekinuti vremensko inverznu simetriju. Za elektrone spina  $\frac{1}{2}$ ,  $T$  ima svojstvo  $T^2 = -1$ . To nas dovodi do najbitnijeg teorema za sustave s invarijantom vremenske inverzije, Kramerovog teorema koji kaže da za svaku energiju u sustavu sa neparnim brojem čestica koje imaju polubrojni spin ( pr.  $\frac{1}{2}$  ) postoje barem dva degenerirana stanja. Ako se teorem primijeni na sustave sa translacijskom simetrijom i napiše Hamiltonijan koji mora zadovoljiti vremensku inverziju, dobivamo: <sup>[1][3][8][9]</sup>

$$\Theta \mathcal{H}(\mathbf{k}) \Theta^{-1} = \mathcal{H}(-\mathbf{k}). \quad (38)$$

Ovo znači da energije vrpce sustava, koji posjeduje simetriju vremenske inverzije, dolaze u parovima koji se nazivaju Kramerovi parovi. Energetske vrpce vremensko inverznog sustava

imaju istu energiju za  $+k$  i  $-k$ . Svaki par vrpca je degeneriran prema vremensko inverznom momentu (TRIM), gdje  $+k$  i  $-k$  postaju jednaki zbog periodičnosti Brillouinove zone. <sup>[1][3][8][9]</sup>



Slika 17. Kramerovi parovi vrpca, svaki degeneriran na vremensko inverznom momentu. <sup>[3]</sup>

### 2.5.5. KVANTNI HALL EFEKT

Izolatori se mogu smatrati stanjima nekvivalentnima vakuumu koji prema Diracovoj relativističkoj kvantnoj teoriji također posjeduje energetski procjep (za proizvodnju parova), vodljivu vrpcu za elektrone te valentnu vrpcu za pozitivne. Nisu sva stanja jednaka vakuumu, a najjednostavniji primjer stanja topološki nekvivalentnog vakuumu je stanje kvantnog Hall efekta. Stanjem kvantnog Hall efekta (QHE) nazivamo stanje kada se dvodimenzionalni elektroni postave u magnetsko polje, odnosno 2D elektronski plin u vanjskom magnetskom polju. Kada se primjeni magnetsko polje na 2D elektronski plin elektroni počinju izvoditi kružne putanje sa ciklotronskom frekvencijom: <sup>[3][4][5]</sup>

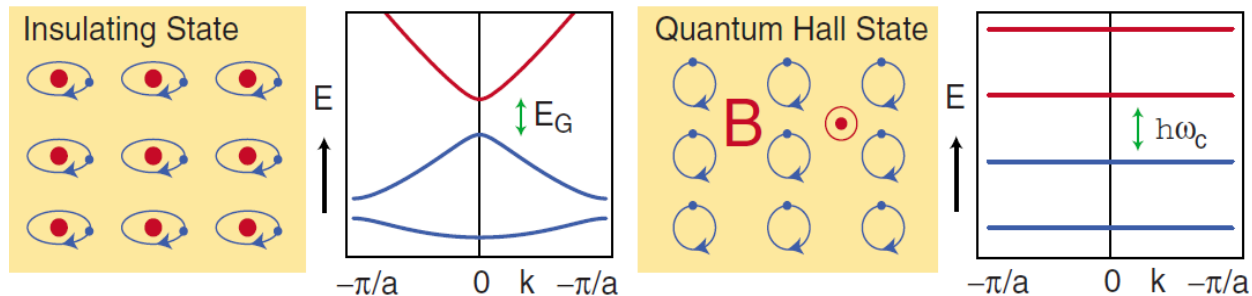
$$\omega_c = eB/m \quad (39)$$

Koja vodi do kvantiziranih Landau razina sa energijom :

$$E_m = (m + \frac{1}{2})\hbar\omega_c \quad (40)$$

Ovo stanje je slično izolatorskom stanju u smislu da energetski procjep razdvaja  $N$  okupiranih Landau razina od praznih stanja te se prema tome Landau razine mogu promatrati kao vrpce.

<sup>[3][4][5]</sup>



Slika 18. Prikaz: (a) izolatorskog stanja i pripadajućih energetske razina, (b) Stanja kvantnog Hall efekta nakon primijenjenog magnetskog polja B te pripadajućih Landau razina. <sup>[4]</sup>

Landau razine se mogu promatrati kao energetske vrpce tj. njihova struktura kao vrpčasta struktura. Budući da se translacijski vektori ne dodiruju međusobno u magnetnom polju, elektronskim stanjima ne možemo pripisati moment. Ukoliko definiramo jediničnu ćeliju određene površine koja zatvara kvantni fluks, tada dolazi do translacija unutar rešetke te su stanja, prema Blochovom teoremu, označena 2D kristalnim momentom  $k$ . U nedostatku periodičkog potencijala, energetske razine su jednostavno  $k$  Landau razine, dok u nedostatku periodičkog potencijal sa istom periodičnosti rešetke dolazi do raspršenja energetske razine sa raspršenjem  $k$ . To vodi do nastanka strukture vrpce koja izgleda identično kao kod običnog izolatora. Električno polje uzrokuje da se stanje kvantnog Hall efekta topološki razlikuje od običnog izolatora. Chernova invarijanta je topološka invarijanta  $n \in \mathbb{Z}$ , koja se može interpretirati kao invarijanta koja karakterizira skupinu Hamiltonijana  $H(\mathbf{k})$  koji se kontinuirano mogu deformirati jedan u drugog bez zatvaranja energetske procjepa. Fizikalno se to može razumjeti u pojmovima Berrijeve faze koja je povezana sa Blochovim valnim funkcijama. Chernova invarijanta je ukupni Berrijev fluks u Brillouinovoj zoni, a ukupni Chernov broj,  $n$ , je suma svih popunjenih vrpca ( $N$ ). <sup>[3][4][5]</sup>

$$n = \sum_{m=1}^N n_m. \quad (41)$$

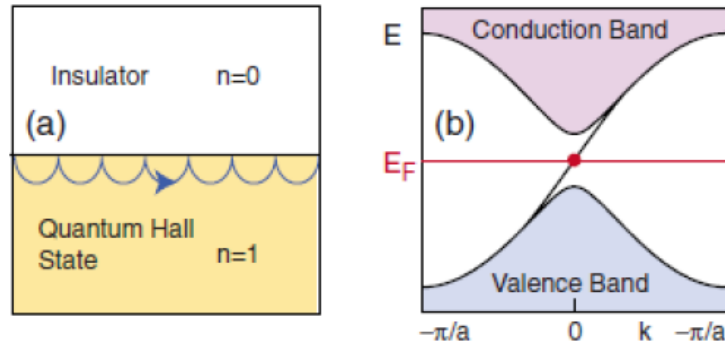
Ako se uzme u obzir kružna putanja oko Brillouinove zone,  $n$  može samo biti višekratnik  $2\pi$  zbog prirode valne funkcije.

### 2.5.5.1. TKNN INVARIJANTA

Thouless, Kohmoto, Nightingale i den Nijs (TKNN) su pokazali da je cijeli broj u kvantiziranoj Hallovoj vodljivosti zapravo Chernov broj,  $n$ . To je razlog zašto je ova invarijanta poznata i kao TKNN invarijanta. Budući da je  $n$  topološka invarijanta, ne dolazi do promjena pri malim deformacijama Hamiltonijana što nam omogućava lakše razumijevanje kvantizacije Hallove vodljivosti ( $\sigma_{xy}$ ). Hallova vodljivost je kvantizirana prema višekratniku  $e^2/h$ .<sup>[3][4]</sup>

$$\sigma_{xy} = (n e^2) / h \quad (42)$$

Integral Gaussove krivulje iznad određene površine definira topološku invarijantu slično kao što je i Chernov broj integral Berrijeve krivulje. Prema topološkoj klasifikaciji vrpčastih struktura sa procjepom, ukoliko postoji određena granica gdje dolazi do promjene topološke invarijante, istovremeno mora postojati vodljivo stanje bez energetskog procjepa na toj granici. Ako pogledamo granicu između kvantnog Hall stanja i vakuuma, možemo shvatiti rubna stanja u smislu preskakujućeg kretanja elektrona kako je prikazano na slici 19.(a).<sup>[3][4]</sup>



Slika 19. Granica između običnog izolatora i kvantnog Hallovog stanja. (a) Preskakujuće kretanje čestica na granici, (b) Prikaz nastanka rubnih stanja, tj. vodljivog kanala koji spaja valentnu i vodljivu vrpču.<sup>[3]</sup>

Poznato je da nabijene čestice u magnetskom polju počinju kružiti oko magnetskog toka zbog Lorentzovih sila. Kada je čestica blizu granice, njezina putanja je ometena i čestica se odbija od čvrste granice i počinje preskakati uz granicu. Elektronska stanja pri ovakvom kretanju se šire tj. putuju samo u jednom smjeru i to uz rub tako da formiraju vodljivi kanal uz granicu što se

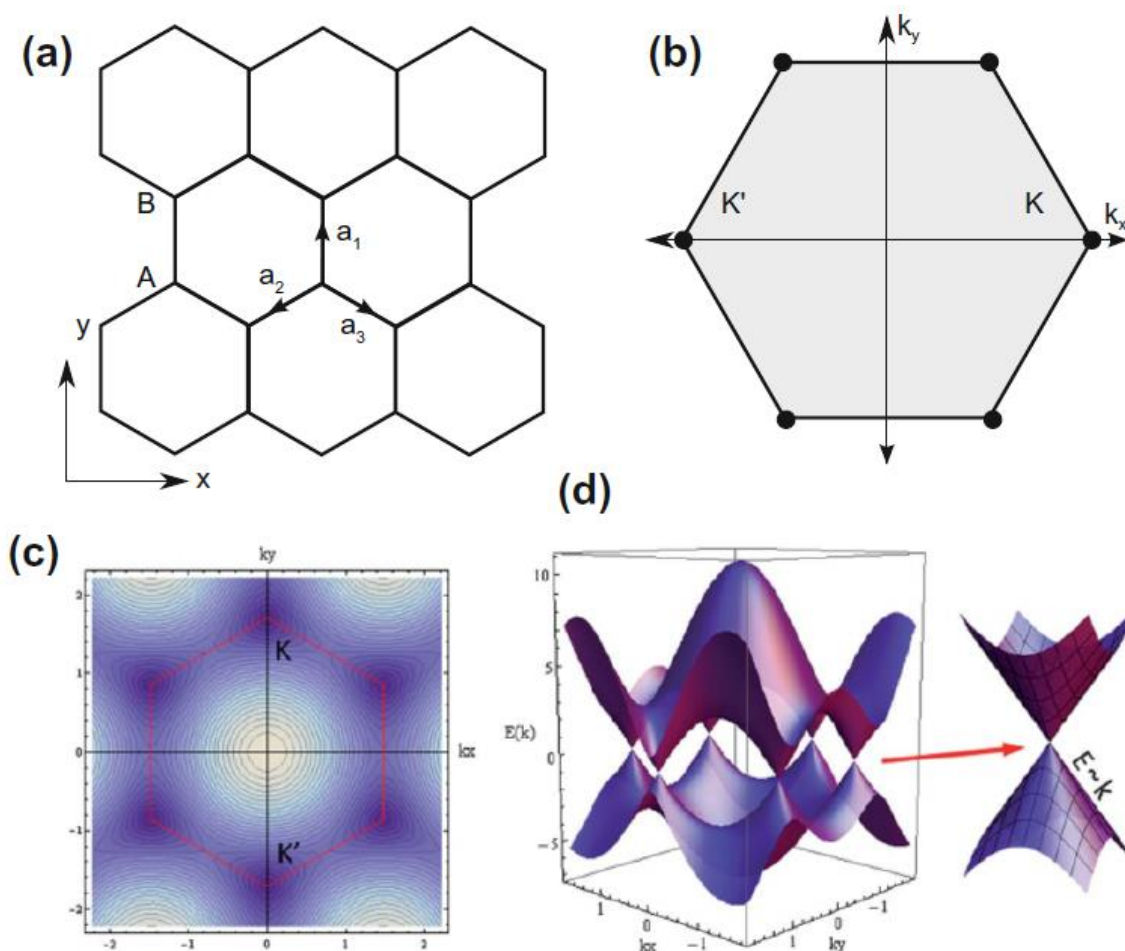


nazivaju rubna stanja i prikazana su na slici 19.(b). Budući da je skupna brzina čestica u masi materijala mnogo manja od ciklotronske brzine, elektroni u masi tvori su lokalizirani zbog nečistoća ili određenih poremećaja u materijalu. U drugu ruku, čestice na rubovima imaju veću skupnu brzinu i na njih ne utječu nečistoće i nepravilnosti. Iz tog razloga rubna stanja čine savršene 1D vodljive kanale.<sup>[3]</sup>

### **2.5.5.2. HALDANE MODEL**

Jednostavan primjer kvantnog Hall efekta u teoriji vrpca je dan modelom grafena u periodičkom magnetnom polju kojeg je 1988. uveo Haldane. Grafen se uvodi iz razloga što će dati uvid u koncept 2D kvantnog spin Hall izolatora te zato što fizika Diracovih elektrona prisutnih u grafenu ima bitnu ulogu na površinama 3D topoloških izolatora. Grafen je 2D alotropska modifikacija ugljika te je trenutno jedan od najzastupljenijih materijala u znanstvenim istraživanjima upravo zbog široke primjene i velikih mogućnosti. Ono što grafen čini zanimljivim je njegova elektronska struktura, gdje se vodljiva i valentna vrpca dodiruju na dva različita mjesta u Brillouinovoj zoni. Blizu tih točaka, disperzija elektrona je linearna i podsjeća na disperziju relativističkih čestica bez mase koje su opisane Diracovom jednačinom. Najjednostavniji opis grafena uključuje model sa dvije vrpce za p-orbitale dva jednaka atoma u jediničnoj ćeliji grafenske kristalne rešetke koja podsjeća na pčelinju košnicu (slika 20.) Diracove se točke javljaju jer dvije komponente  $h(k)$  mogu imati vrijednost nula u dvije dimenzije. Kod grafena se to javlja u točkama  $K$  i  $K' = -K$ , čija su mjesta na rubovima Brillouinove zone fiksirana rotacijskom simetrijom grafena (slika 20.) . Degeneracija u Diracovim točkama, zaštićena je  $P$  i  $T$  simetrijom. Prekidanjem tih simetrija, može se ukloniti degeneracija.  $P$  simetrija je prekinuta ukoliko imamo dva neekvivalentna atoma u jediničnoj ćeliji. To omogućava da  $h_z(k)$  poprimi vrijednosti različite od nule. Ako je  $h_z(k)$  malen, u blizini  $K$ , tada Blochov Hamiltonijan postaje maseni Diracov Hamiltonijan. Treba uzeti u obzir da  $T$  simetrija zahtjeva da Diracova točka u  $K'$  ima masu  $m' = h_z(K')$  istog predznaka i vrijednosti kao i  $m' = m$ . Takvo stanje sa masama jednakog predznaka opisuje običan izolator. Haldane je uklonio degeneraciju prekidom  $T$  simetrije pomoću magnetskog polja prosječne vrijednosti nula, ali sa potpunom simetrijom rešetke U tom slučaju  $P$  simetrija zahtjeva da mase  $K$  i  $K'$  imaju suprotan predznak  $m' = -m$ . Haldane je pokazao da takvo stanje sa procjepom nije izolatorsko, već stanje

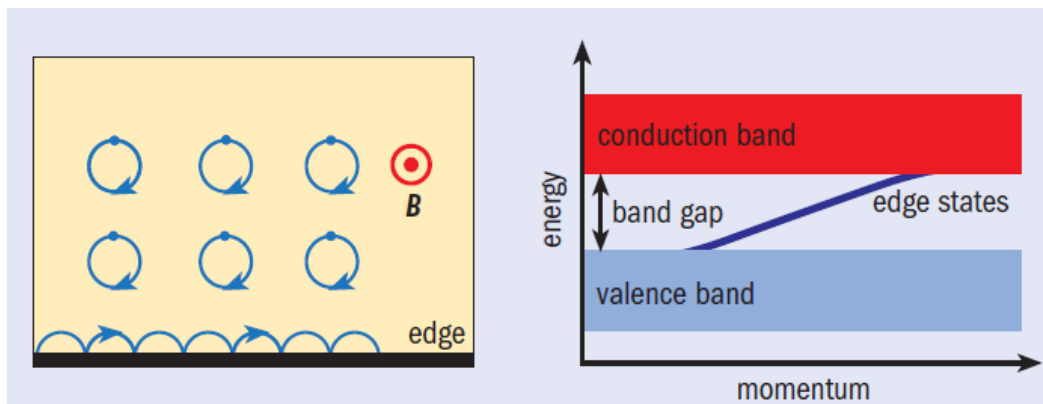
kvantnog Hall efekta. Za Hamiltonijan sa dvije razine, Berrijev tok je povezan sa prostornim kutem kojeg određuje jedinični vektor  $\hat{h}(k)$ . Zanima nas koliko puta  $\hat{h}(k)$  obilazi jediničnu sferu kao funkcija ovisna o  $k$ . Svaka Diracova točka doprinosi Hallovoj vodljivosti  $\sigma_{xy}$  sa  $\pm e^2/2h$ . U izolatorskom stanju sa  $m = m'$  dva se doprinosa oduzimaju pa imamo  $\sigma_{xy} = 0$ , dok se u kvantnom Hall stanju zbrajaju. Nezaobilazno je postojanje parnog broja Diracovih točaka, jer bi se inače Hallova vodljivost kvantizirala na pola cijelog broja. Postoji teorem dupliranja fermiona koji garantira da za T invarijantni sustav Diracove točke dolaze u parovima. <sup>[1][4]</sup>



Slika 20. (a) Kristalna rešetka grafena. (b),(c) Brillouinova zona u grafenu sa prikazom rubnih točaka K i K' , (d) Dvije vrpce  $p_z$  orbitale, koje se dodiruju u dvije točke u ćeliji (K i K') te uvećan prikaz Diracove točke. <sup>[1][5]</sup>

### 2.5.5.3. KIRALNA RUBNA STANJA I VOUMNO-RUBNA KORESPONDENCIJA

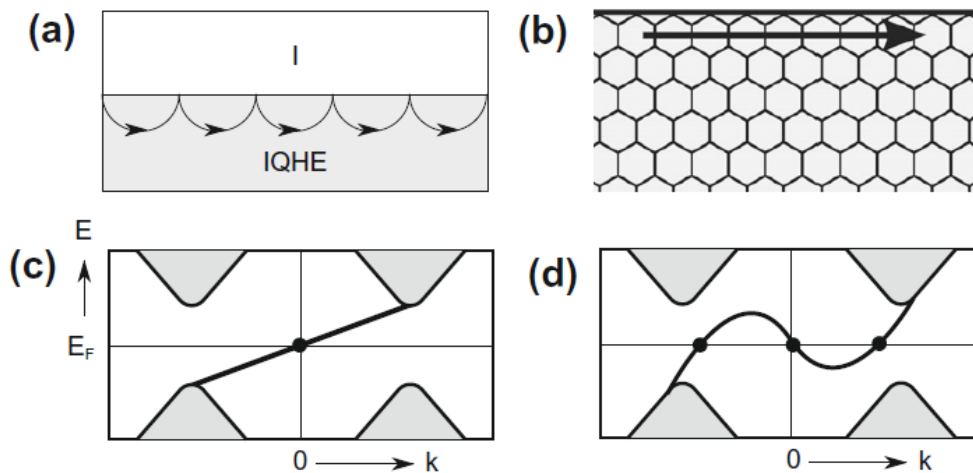
Bitna posljedica topološke klasifikacije vrpčastih energetske struktura s procjepom, je postojanje vodljivih stanja bez procjeka na prijelazima na kojima se topološka invarijanta mijenja. Takva su površinska stanja dobro poznata na prijelazima između vakuuma i stanja kvantnog Hall efekta kao što je prikazano na slici 19. te na slici 21. Ona se mogu shvatiti u kontekstu ciklotronskog kretanja elektrona sa putanjama koje se susreću s granicom. <sup>[1][13]</sup>



Slika 21. Prikaz kvantnog Hall efekta – ciklotronsko kretanje elektrona u magnetnom polju ( $B$ ) je prekinuto granicom gdje elektroni preskakuju orbitale što vodi do nastanka vodljivog kanala u jednom smjeru duž ruba. <sup>[13]</sup>

Elektronska stanja odgovorna za takvo ponašanje, kiralna su u smislu propagacije elektrona u jednom smjeru duž granice. Takva su stanja neovisna o neredu, jer ne postoje stanja u koja bi se mogli raspršiti unatrag. Nedoizvoljeno raspršenje unatrag, osnova je savršeno kvantiziranog elektronskog transporta u kvantnom Hallovom efektu. Postojanje takvog jednosmjernog rubnog stanja, duboko je povezano sa topologijom volumnog kvantnog Hall stanja. Zamislamo granicu u kojoj kristal, kao funkcija prostora  $y$ , sporo prelazi između stanja kvantnog Hall efekta ( $n = 1$ ) i trivijalnog izolatora ( $n = 0$ ). Negdje na putu između stanja, energetski procjep mora nestati jer bi inače bilo nemoguće da se topološka invarijanta promjeni. Iz tog razloga moraju postojati niskoenergetska elektronska stanja vezana za područje u kojem energetski procjep prolazi kroz nulu. Takav odnos između topologije i stanja bez procjeka, neizbježan je u fizici i javlja se u puno slučajeva. Originalno je pronađen sa strane Jackiwa i Rebbija u analizi 1D teorije polja. Po uzoru na njihov rad, može se razviti jednostavan model kiralnih rubnih stanja korištenjem Diracovog

modela sa dvije vrpce. Vrpca siječe Fermijevu energiju  $E_F$  kako je prikazano na slici 19. Valentna i vodljiva vrpca formiraju kontinuirana stanja, a energetski procjep u blizini  $K$  i  $K'$  te jedna vrpca koja povezuju valentnu i vodljivu vrpcu i opisuje vodljiva rubna stanja s pozitivnom grupnom brzinom.



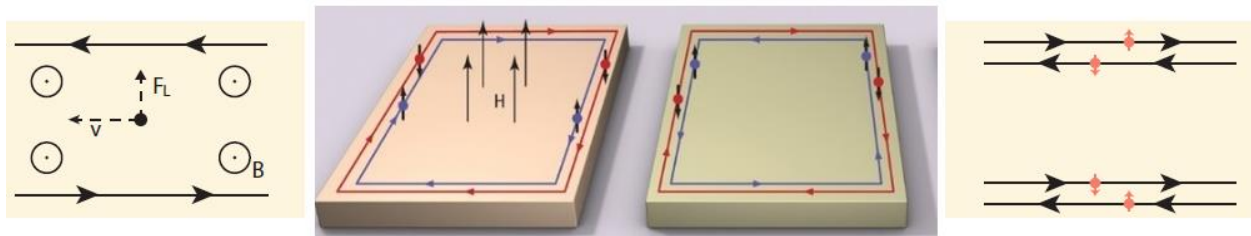
Slika 22. (a) Ciklotronska putanja elektrona po rubnim stanjima. (b) Rubna stanja u Haldane modelu na polubeskonačnoj ravnini. (c) Kiralna rubna stanja spajaju valentnu vrpcu sa vodljivom u blizini  $K$  i  $K'$ . (d) Promjena Hamiltonijana rubnih stanja, volumno-rubna korespondencija se ne mijenja. <sup>[1]</sup>

Promjenom Hamiltonijana u blizini ruba, moguće je modificirati rubna stanja. Takve promjene u Hamiltonijanu mogu biti uzrokovane defektima u kristalnoj rešetci. Razlika  $N_R - N_L$  između broja modova sa desnim i lijevim gibanjem ostaje konstantna i određena je topološkom strukturom volumnih stanja. To se naziva volumno-rubnom korespondencijom: <sup>[1][4][3]</sup>

$$N_R - N_L = \Delta n \quad (43)$$

### 2.5.6. KVANTNI SPIN HALL EFEKT

Elektroni koji se kreću u suprotnim smjerovima su prostorno razdvojeni pod utjecajem Lorentzove sile zbog primijenjenog magnetskog polja. Rezultat toga je stanje u kojem su elektroni zaštićeni od povratnog raspršivanja jer se mogu kretati samo prema naprijed. Taj efekt je poznat kao kvantni Hallov efekt. Ovakvo zaštićeno stanje transporta elektrona je jako zanimljivo za poluvodičke uređaje, ali kvantni Hallov efekt se oslanja na jaka magnetska polja koja limitiraju praktičnu primjenu. Na pitanje da li postoji određeni slični efekt koji ne zahtijeva vanjsko magnetsko polje dobivamo odgovor u kvantnom spin Hall efektu. <sup>[11]</sup> Dok kvantni Hallov efekt zahtijeva vanjsko magnetsko polje, koje prekida simetriju vremenske inverzije, stanja kvantnog spin Hall efekta (QSHE) su vremenski inverzno invarijantna te ne trebaju primijenjeno magnetsko polje. Izolatorsko stanje kvantnog spin Hall efekta je u osnovi stanje kvantnog Hall efekta sa suprotnim kiralnostima. Efekt se sastoji od gornjeg ruba po kojemu se spin-gore čestice kreću prema naprijed, a spin-dolje čestice unatrag, te od donjeg ruba po kojemu se spin-gore čestice kreću unatrag, a spin-dolje unaprijed što je prikazano na slici 23. <sup>[3]</sup>



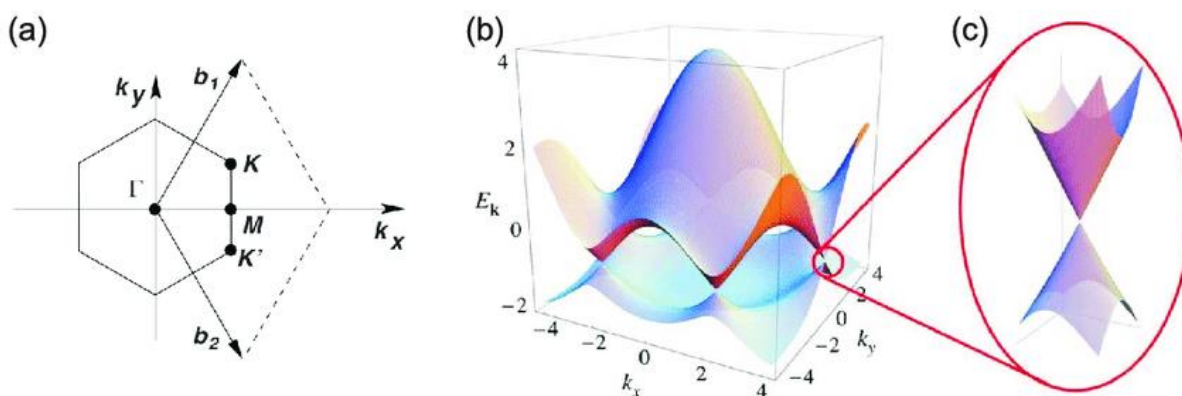
Slika 23. Prikaz kvantnog Hall efekta lijevo te kvantnog spin Hall efekta desno.

U kvantnom spin Hall efektu, oba ruba dozvoljavaju kretanje elektrona u oba smjera, ali elektroni koji se kreću u suprotnom smjeru, moraju biti suprotnog spina. Ako dođe do raspršenja u ovakvom sustavu, mora doći i do promjene spina. Ta rotacija može biti u smjeru kazaljke na satu ( $-\pi$ ) ili u suprotnom smjeru od kazaljke na satu ( $+\pi$ ). Raspršeno stanje je u kvantnoj mehanici linearna kombinacija oba slučaja koji se razlikuju za rotaciju od  $2\pi$ . Rotacija od  $2\pi$  u spinskom prostoru za česticu spina  $\frac{1}{2}$  vodi do negativnog predznaka valne funkcije pa se dva moguća stanja razlikuju prema negativnom predznaku te stoga dolazi do destruktivne interferencije pa je iz tog razloga u takvom sustavu raspršenje nedozvoljeno. [1][3]

Charles Kane i Eugene Mele su 2005. pokazali da se takav sustav kvantnog spin Hall efekta može realizirati u praksi i to su pokazali na modelu grafena. U grafenu se elektroni ponašaju kao dvodimenzionalni elektronski plin (2DEG) te je takvo stanje moguće zbog spin-orbit interakcija. Spin-orbit interakcije su odgovorne za povezivanje spina sa orbitalnim kretanjem elektrona te za nastajanje suprotnog spinskog stanja karakterističnog za ovakvo stanje. Ako Hamiltonijane za spin-gore i spin-dolje gledamo zasebno, primijećuje se da prekidaju simetriju vremenske inverzije. U primijenjenom električnom polju, čestice različitog spina posjeduju Hallove struje u suprotnim smjerovima što dovodi do poništavanja te do ponovnog uspostavljanja simetrije vremenske inverzije. <sup>[3]</sup> Spinska struja se generira prema spin Hall vodljivosti prema jednadžbi te od tuda dolazi ime kvantni spin Hall efekt.

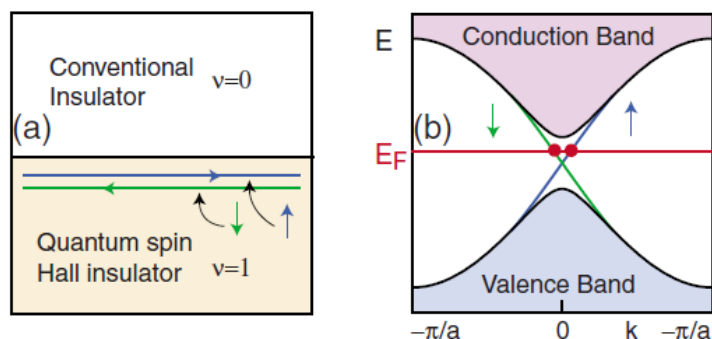
$$\sigma_{xy}^S = e/2\pi \quad (44)$$

Očuvanje spina se ne događa u realnim sustavima pa nam kvantna Hallova vodljivost služi samo kao jednostavni primjer. Stanje kvantnog spin Hall efekta također ima stanja bez energetskog procjepa. Ova stanja ostaju nepromijenjena čak i ako dođe do prekida očuvanja spina. Stanja kvantnog spin Hall efekta uvijek poštuju svojstvo da se čestice različitog spina kreću u različitim smjerovima, poznatije kao spiralnost. Spiralna stanja formiraju jedinstveni 1D vodič te ne mogu biti lokalizirana niti pri većim podražajima. Ako se simetrija vremenske inverzije ne prekine, slučajni elektron će biti savršeno prenesen kroz područje pod podražajem. Iz tog razloga su rubna stanja zaštićena simetrijom vremenske inverzije. <sup>[3]</sup>



Slika 24. Prikaz nastanka Diracovih konusa u dvije točke grafenske rešetke.

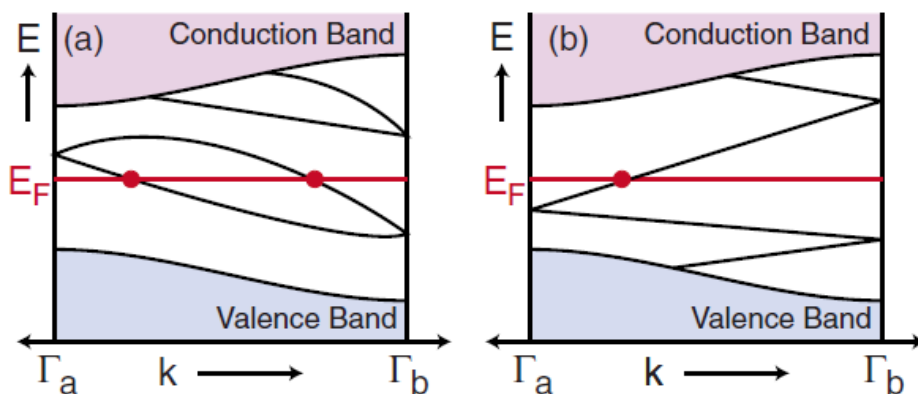
U grafenu dolazi do preklapanja valentne i vodljive vrpce u dvije točke u Brillouinovoj zoni kao što je prikazano na slici 24. Blizu tih točaka, disperzija elektrona je linearna te se može opisati Diracovom jednačinom. Ta disperzija elektrona se iz tog razlog naziva Diracovim konusom te se elektroni ponašaju kao Diracovi fermioni bez mase. [4] [3] Model Kane-a i Mele-a je pokazao da spin-orbit interakcije vode do otvaranja procjepa na mjestu križanja u konusu, u Diracovoj točki. Također pokazuje da se par spin-polariziranih stanja sa simetrijom vremenske inverzije pojavljuje na rubu. Spin-polarizacija rubnih stanja je moguća zbog spin-orbit interakcija koje su zaslužne za poravnavanje spinova u odnosu na moment elektrona. Budući da se elektroni u stanjima bez procjepa ponašaju kao 1D Diracovi fermioni bez mase unutar procjepa koji se nalazi u 2D konusu. [4] Iz tog razloga se elektroni u masi tvari ponašaju kao 2D Diracovi fermioni sa masom zbog konačnog energetskog procjepa u Diracovoj točki. [3][4] Nažalost, spin-orbit interakcije u grafenu su slabe pa je teško eksperimentalno vidjeti kvantni spin Hall efekt. Još jedan teoretski napredak postignut je od strane Bernevig, Hughesa i Zhanga (BHZ) koji su izradili 2D model kako bi proizveli  $Z_2$  topološku fazu zasnovanu na strukturi vrpce HgTe. Na temelju svog modela su predvidjeli da CdTe/HgTe/CdTe kvantna udubljena pokazuju kvantni spin Hall efekt. [4] To predviđanje je potvrdio König koji je uočio da je Hallova vodljivost kvantizirana u nultom magnetskom polju kada je kemijski potencijal namješten prema energetskom procjepu mase tvari. To nam daje dokaze da u izolatorskom stanju postoje stanja bez energetskog procjepa. Ovo se smatra prvom eksperimentalnom potvrdom vremensko inverzne varijante topoloških izolatora koja je karakterizirana  $Z_2$  topologijom. [9] [4]



Slika 25. Rubna stanja za izolatorsko stanje kvantnog spin Hall efekta. (a) Granica između normalnog izolatora i QSHE. (b) Nastanak Diracovog konusa i točke rapršenjem rubnih stanja [4]

### 2.5.6.1. $Z_2$ TOPOLOŠKA INVARIJANTA

$Z_2$  invarijanta govori da li je broj situacija, kada 1D rubno stanje pređe preko Fermijeve razine između  $0$  i  $\pi/a$ , paran ili neparan. U matematici, skupina cijelih brojeva dobiva oznaku  $Z$  dok njezina podskupina koja klasificira parne i neparne brojeve ima oznaku  $Z_2$ . Iz tog razloga je ova topološka invarijanta dobila ime jer općenito daje topološku klasifikaciju zasnovanu na parnosti. Otkriće  $Z_2$  topologije u izolatorima je velik korak prema razumijevanju topoloških faza materije jer potvrđuje da netrivialna topologija može biti ugrađena u strukturu vrpce običnog izolatora i da prekidanje vremensko inverzne simetrije primjenom magnetskog polja nije nužno za dobivanje topoloških faza. [9] 2D topološki izolatori se mogu klasificirati prema  $Z_2$  topološkoj invarijanti. Ako pogledamo sliku 26., koja prikazuje površinska stanja između dvije točke vremensko inverzne invarijante označene sa  $\Gamma_a=0$  i  $\Gamma_b=\pi/a$ . Na a) slici dolazi do uparivanja ta dva stanja koja sijeku Fermijevu energiju ( $E_F$ ) paran broj puta (2) označeno crvenim točkama. Ta površinska stanja su topološki trivijalna jer određeni nered može uzrokovati pomicanje energetskih vrpca površine iznad ili ispod Fermijeve razine te tada dolazi do eliminacije rubnih stanja. [4] Na slici b) možemo vidjeti da vrpce sijeku Fermijevu energiju samo jednom, tj. neparan broj puta, te rubna stanja ne mogu biti eliminirana. Iz tog razloga se topološki trivijalna stanja označavaju sa  $\nu = 0$ , a stanja kvantnog spin Hall efekta sa  $\nu = 1$ . [3] [4]



Slika 26. Elektronika disperzija između dvije granične degenerirane Kramerove točke. Broj površinskih stanja koja presijecaju Fermijevu energiju: (a) paran, (b) neparan – nastanak topološki zaštićenih metalnih rubnih stanja. [4]

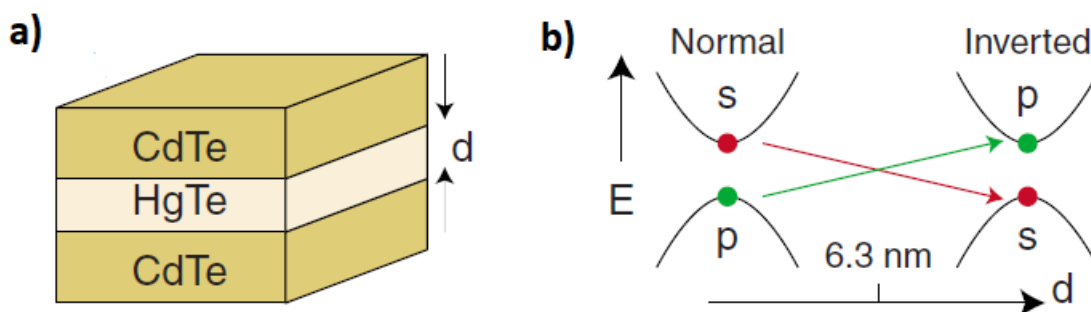


### 2.5.6.2. 2D TOPOLOŠKI IZOLATORI

Grafen je sačinjen od ugljika, laganog elementa sa slabim spin-orbit interakcijama te malim energetske procjepom. Kako bi se bolje shvatilo kakva bi bila fizika u materijalima sa snažnom spin-orbit interakcijom, nastala je ideja o težim elementima s dna periodnog sustava. Bernevig, Hughes i Zhang su razmotrili strukture HgCdTe kvantnih udubljenja. To je dovelo do eksperimentalnog otkrića izolatorske faze kvantnog spin Hall efekta. <sup>[4]</sup>

#### 2.5.6.2.1. HgTe/CdTe KVANTNE STRUKTURE

Prvi materijal koji je eksperimentalno dokazan kao topološki izolator vremenski inverzne invarijante je CdTe/HgTe/CdTe kvantno udubljenje. Živin telurid (HgTe) stavljen između kadmijevog telurida (CdTe) s obje strane daje "sandwich" strukturu. Razlog zašto se ovaj efekt javlja u ovim posebnim materijalima je vezan uz njihovu atomsku masu. Spin-orbit interakcije su relativistički efekt koji je najbolje izražen u težim elementima. <sup>[11]</sup> Tanki sloj HgTe između slojeva CdTe predstavlja 2D sustav gdje stupanj slobode za okomiti smjer gibanja nestaje zbog kvantnog ograničavanja elektronskih stanja HgTe te rezultira formiranjem podvrpca. <sup>[9]</sup>



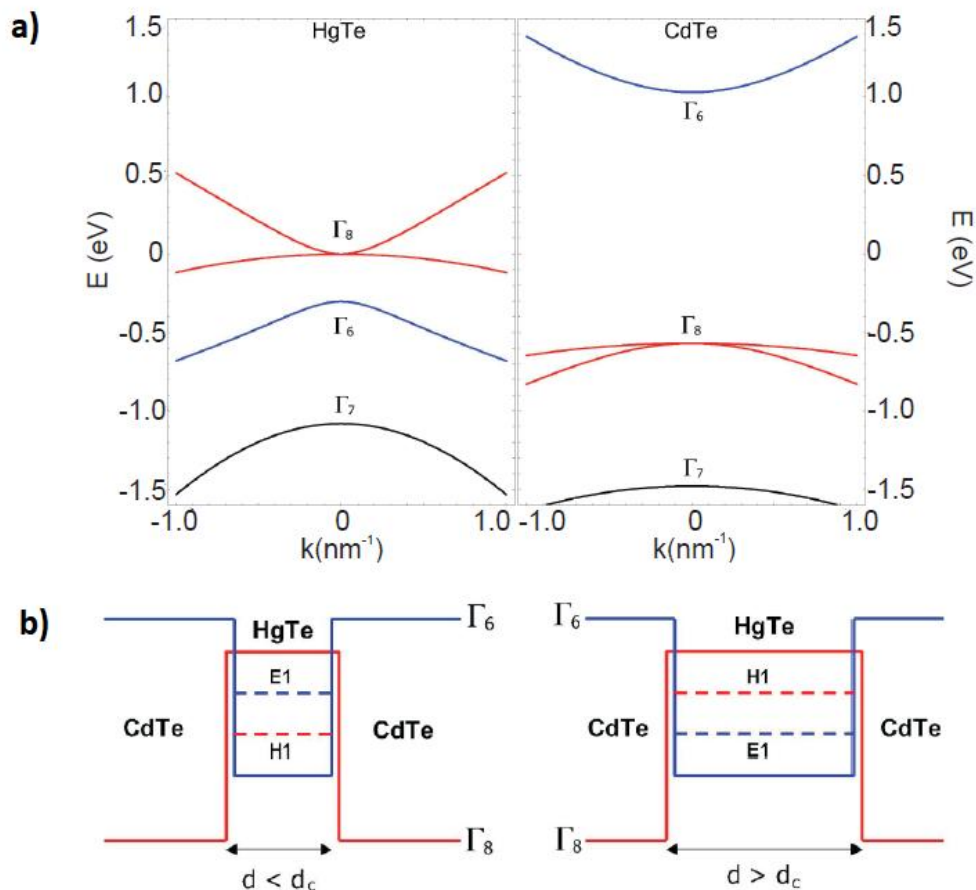
Slika 27. (a) Struktura CdTe/HgTe/CdTe kvantnog udubljenja , (b) Inverzija p- i s- orbitala.

Zbog kristalizirajućih svojstava HgTe i CdTe, njihove kristalne rešetke su od velikog interesa za tehnološke primjene. Inverzija s- i p- orbitale je nužna kako bi sustav poprimio svojstva topološkog izolatora. Kvantna struktura CdTe/HgTe/CdTe te inverzija orbitala su prikazane na slici 27. U masi HgTe se takva inverzija događa dok kod CdTe ne. Iz tog razloga, HgTe se može smatrati dobrim početnim materijalom za dobivanje faze topološkog izolatora. Međutim postoji

jedan problem, u strukturi vrpce masenog HgTe, zaštićena kristalna simetrija degeneracije u točki  $\Gamma$  čini sustav intrinzičkim poluvodičem nultog energetskog procjeka što znači da nema energetskog procjeka između p- i s- orbitale te da se sustav ne može klasificirati kao izolator. Ali ako se HgTe postavi između dva sloja CdTe (u “sandwich” strukturu), koji ima nešto veću konstantu rešetke, epitaksijalno naprezanje koje se vrši nad HgTe prekida simetriju kubične rešetke i utječe na otvaranja procjeka te se tada sustav može zvati pravim izolatorom. Prema BHZ modelu, predviđeno je da iznad određene kritične debljine, HgTe zadržava inverziju vrpce te bi se trebao ponašati kao topološki izolator. Ovo predviđanje je potvrđeno pomoću transportnog eksperimenta mikro proizvedenih uzoraka. Otkrilo se da kada je debljina HgTe jedinice veća od kritične debljine ( $d_c = 6.3$  nm), uzorci pokazuju negativni energetski procjep, odnosno dolazi do inverzije vrpce te do kvantizacije vodljivosti za  $2e^2/h$  koja je primijećena u nultom magnetskom polju kada se kemijski potencijal namjesti prema procjeku. Suprotno tome, kada je debljina ispod kritične, inverzija vrpce nestaje te je primijećen divergirajući otpor. Würzburg grupa je kasnije primijetila nelokalni transport koji je poduprio teoriju o postojanju rubnih stanja. Pokazali su da 1D stanja, odgovorna za kvantizirani transport u dvodimenzionalnoj fazi topološkog izolatora, posjeduju spiralnu spinsku polarizaciju. CdTe/HgTe/CdTe kvantna struktura se može podesiti da ima veliku mobilnost nosilaca naboja što omogućuje proučavanje svojstava kvantnog transporta. Nedostatak ovog sustava je mali energetski procjep u masi materijala koji nastaje zbog epitaksijalnih naprezanja što rezultira mogućom detekcijom topološke faze samo pri vrlo niskim temperaturama. <sup>[9][4]</sup>

U dovoljno debelim slojevima HgTe ( $d > d_c = 6.3$  nm), spin-orbit interakcije su toliko jake da dolazi do inverzije p- i s- orbitale, koje su inače valentna i vodljiva vrpca, kako je prikazano na slici 28. Za kvantna udubljenja sa debljinom manjom od kritične ( $d < d_c$ ), ovaj efekt se ne događa. Objašnjenje toga dano je činjenicom da su energetske razine u tankim kvantnim udubljenjima pod utjecajem CdTe okruženja te spin-orbit interakcije ne mogu nadjačati taj utjecaj. Kada dođe do inverzije vrpce u HgTe, vrpce se moraju međusobno križati na granici HgTe sa normalnim materijalom, gdje inverzne vrpce moraju biti spojene sa normalnim, neinverznim vrpcama. U originalnoj teoriji, normalni materijal je bio CdTe, ali može biti i vakuum. Ako dođe do

križanja vodljive i valentne vrpce, nastaje vodljivo stanje koje manifestira stanje kvantnog spin Hall efekta upravo zbog spin-orbit interakcija. <sup>[11][4]</sup>



Slika 28. Inverzija vrpca u HgTe kvantnim udubljenjima. (a) U HgTe p- (crvena) i s- orbitala (plava) su zamijenjene u odnosu na normalni slučaj u CdTe desno. (b) Potpuna inverzija vrpca dozvoljena tek kada je sloj HgTe deblji od kritične debljine ,  $d > d_c = 6.3 \text{ nm}$ .<sup>[11]</sup>

U slučaju topoloških izolatora, križanje vodljive i valentne vrpce se može gledati kao trganje i ljepljenje u topologiji te iz tog razloga normalni materijali i topološki izolatori spadaju u drugačije topološke klase. Ispostavilo se da su te klase tj. skupine karakterizirane topološkom invarijantom  $Z_2$ , koja može poprimiti vrijednost 0 za normalne materijale, ili 1 za topološke izolatore. <sup>[11][4]</sup>

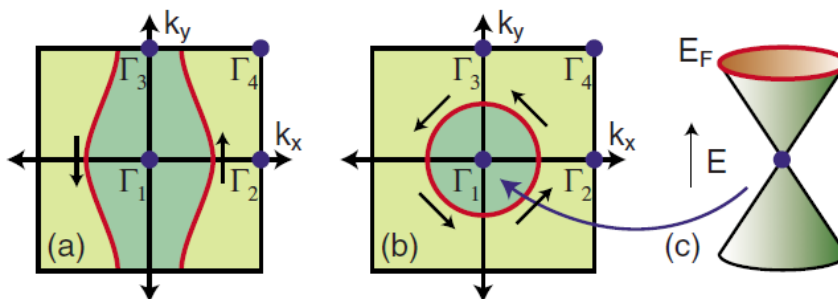
#### 2.5.6.2.2. POTENCIJALNI 2D TOPOLOŠKI IZOLATORI

Nedavno je došlo do otkrića novog 2D topološkog sustava koji pokazuje svojstva topološkog izolatora. Radi se o kvantnom sustavu AlSb/InAs/GaSb/AlSb koji je teoretski predviđen i eksperimentalno potvrđen. Princip rada ovog sustava je sljedeći, vrh valentne vrpce GaSb se nalazi iznad dna vodljive vrpce InAs. Iz tog razloga, kada su InAs i GaSb u direktnom kontaktu, i oba su kvantno ograničena preko vanjskih slojeva AlSb koji ima veliki energetski procjep te služi kao granica, rezultirajuća podvrpca šupljina može se nalaziti iznad elektronske podvrpce u InAs te dolazi do inverzije vrpce u kvantnom sustavu. Energetski procjep u ovakvom sustavu nastaje zbog anti križanja dvije podvrpce pri konačnom momentu te je iz tog razloga vrlo mali što obzervaciju spiralnih stanja čini težom. U ovakvom sustavu je zabilježena kvantizacija vodljivosti što je postignuto uvođenjem nereda na InAs/GaSb granicu dopiranjem sa silicijem kako bi se neželjeni nosioci naboja iz mase tvari lokalizirali. Drugi mogući kandidati za 2D topološki izolator uključuju dvosloj bizmuta,  $\text{Na}_2\text{IrO}_3$  i grafen s umjetno pojačanim spin-orbit interakcijama. Napravljena su određena eksperimentalna mjerenja te su dobiveni određeni dokazi za pretpostavku postojanja rubnih stanja. Također vrijedi spomenuti silicen, analog grafena koji se sastoji od atoma silicija umjesto ugljika, za kojeg se također predviđaju 2D topološka svojstva izolatora. <sup>[9]</sup>

## 2.6. 3D TOPOLOŠKI IZOLATORI

Da se topološka karakterizacija kvantnog spin Hall efekta može prirodno generalizirati u tri dimenzije, otkrile su tri neovisne grupe znanstvenika 2006. godine. Moore i Balents, iz jedne od navedenih skupina, nazvali su novu električnu fazu topološki izolator, a Fu, Kane i Mele su utvrdili vezu između volumnog topološkog uređenja i jedinstvenih vodljivih površinskih stanja. Nedugo nakon, ta je faza predviđena u nekoliko materijala, uključujući HgTe,  $\alpha$ -Sn te  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  na kojem je eksperimentalno dokazano stanje 3D topološkog izolatora 2008. godine. <sup>[1][4][5]</sup>

3D topološki izolator karakteriziran je sa četiri  $Z_2$  topološke invarijante ( $\nu_0; \nu_1 \nu_2 \nu_3$ ). Najjednostavnije ih je za razumjeti preko volumno-rubne korespondencije. Površinska stanja 3D kristala se mogu označiti sa 2D kristalnim momentom. Postoje 4 invarijantne točke na površini Brillouinove zone ( $\Gamma_{1,2,3,4}$ ), gdje površinska stanja, ako postoje, moraju biti Kramerova degenerirana stanja kako je prikazano na slici 29. (a) i (b). <sup>[1][4]</sup> Ako se udaljimo od tih točaka, spin-orbit interakcije će uzrokovati veću degeneraciju. Iz tih Kramerovih degeneriranih točaka dobivamo 2D Diracove točke u strukturi površine vrpce prikazano na slici 29. (c). <sup>[1][4]</sup>



Slika 29. Prikaz 4 invarijantne točke ( $\Gamma_{1,2,3,4}$ ) i Fermijevih krugova na površini Brillouinove zone za (a) slabi topološki izolator, (b) jaki topološki izolator. (c) U najjednostavnijem jakom topološkom izolatoru Fermijev krug tvori jednu Diracovu točku.

Diracove točke se pri različitim  $T$  invarijantnim točkama spajaju. Između  $\Gamma_a$  i  $\Gamma_b$ , struktura površinskih stanja će izgledati kao jedno od dva moguća stanja prikazanih na slici 29. To određuje da li će Fermijeva površina presjecati liniju koja spaja  $\Gamma_a$  i  $\Gamma_b$  paran ili neparan broj

puta. Ako je broj neparan, tad su površinska stanja topološki zaštićena. Koji od ova dva slučaja će se desiti je određeno sa četiri volumne  $Z_2$  invarijante. <sup>[1][4]</sup>

### **2.6.1. SLABI TOPOLOŠKI IZOLATORI**

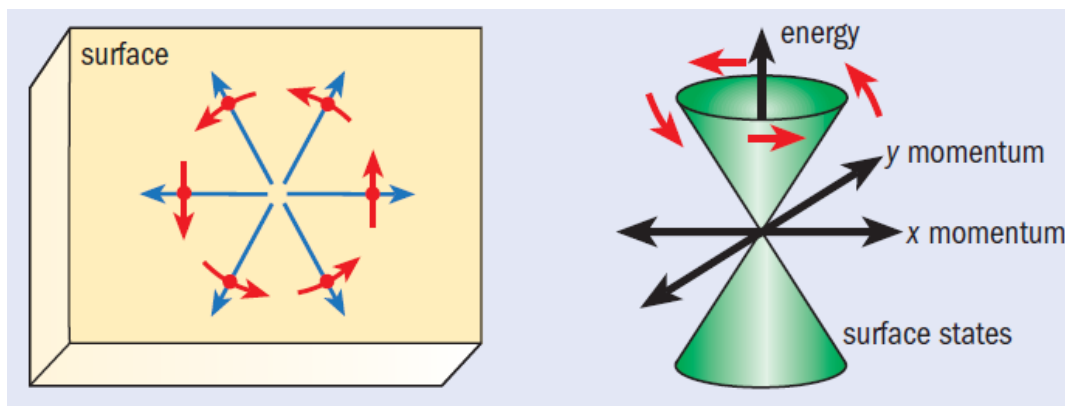
Najjednostavniji netrivialni 3D topološki izolator može se konstruirati spajanjem slojeva 2D kvantnog spin Hall izolatora. Analogno tome vrijedi i za konstrukciju 3D kvantnih Hall stanja. Ako uzmemo u obzir slaganje slojeva koji su slabo spareni, svaki sloj će imati određenu Hallovu vodljivost što će dovesti do nastanka 3D tenzora. Rubna stanja na svakom sloju formiraju kiralna površinska stanja koja uz Hallovu vodljivost ostaju nepromijenjena kada se rubna stanja upare, te će energetski procjep ostati konačan. Tada je vektor recipročne rešetke definiran pomoću tri Chernova broja koja karakteriziraju tri zasebne ravnine u prostoru. U slabo sparenim 2D kvantnim spin izolatorskim slojevima, spiralna stanja postaju anizotropna površinska stanja. Moguća Fermijeva površina slabo uparenih slojeva prikazana je na slici 29.(a). Vidimo da jedna površinska vrpca presijeca Fermijevu energiju između točaka 1 i 2 te 3 i 4. Ovakvo poslagano stanje, naziva se slabim topološkim izolatorom koji je karakteriziran invarijantom  $\nu_0=0$ . Za razliku od 2D spiralnih stanja jednog sloja, T simetrija ne štiti ovakva 3D površinska stanja. Iako površinska stanja moraju biti prisutna radi čiste površine, moguće ih je eliminirati bez zatvaranja energetskog procjeka prekidanjem translacijske simetrije. Slabi topološki izolatori su povezani sa 1D spiralnim rubnim stanjima, a ako je povezivanje između slojeva jače, rubna stanja neće nestati. <sup>[1][4]</sup>

### **2.6.2. JAKI TOPOLOŠKI IZOLATORI**

$\nu_0 = 1$  označava fazu jakog topološkog izolatora, koja se ne može interpretirati pomoću stanja 2D kvantnog Hall efekta. Kao što je navedeno ranije,  $\nu_0$  određuje parnost broja Kramerovih točaka zatvorenih površinskim Fermijevim krugom. Kod jakog topološkog izolatora, Fermijev krug zatvara neparan broj Kramer degeneriranih Diracovih točaka. Najjednostavniji slučaj, sa jednom Diracovom točkom, može se opisati Hamiltonijanom: <sup>[1][4]</sup>

$$H_{surface} = -i\hbar v_F \sigma \cdot \nabla \quad (44)$$

gdje je  $\sigma$  spin elektrona. Površinska elektronska struktura topološkog izolatora je slična grafenu, osim što umjesto četiri Diracove točke postoji jedna. Ta razlika stvara probleme u vidu ranije spomenutog teorema udvostručavanja fermiona koji kaže da Diracove točke u T invarijantnom sustavu dolaze u parovima. Smatra se da je par Diracove točke na suprotnoj površini kristala. Površinska stanja jakih topoloških izolatora posjeduju jedinstveno metalno ponašanje. Za razliku od običnih metala, koji posjeduju spin gore elektrone i spin dolje elektrone, u svakoj točki Fermijeve površine, kod površinskih stanja topoloških izolatora nema degeneracije spina. T simetrija zahtijeva da stanja momenta  $k$  i  $-k$  imaju suprotne spinove pa iz tog razloga dolazi do rotacije spina pomoću  $k$  oko Fermijeve površine, kao što je prikazano na slikama 29.(b) i 30. <sup>[1][4]</sup>

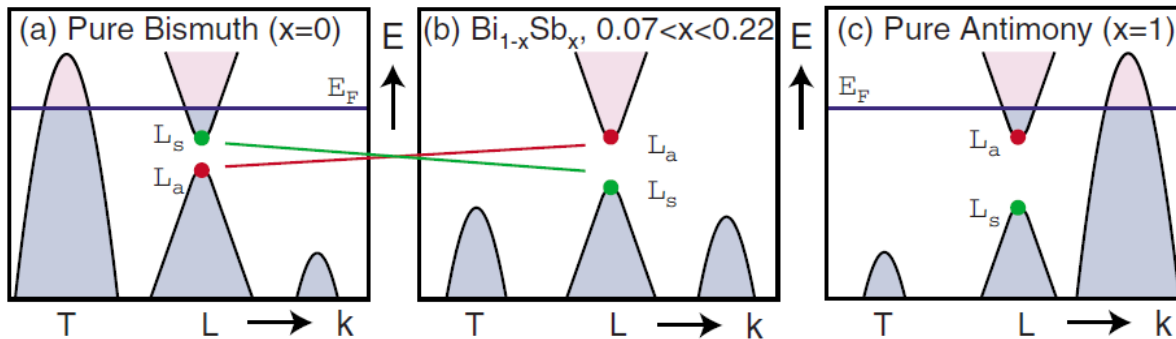


Slika 30. Prikaz rotacije spina oko Fermijeve površine 3D topološkog izolatora te pripadni Diracov konus koji nastaje zbog 2D odnosa energije i momenta. <sup>[13]</sup>

### 2.6.3. PRVI 3D TOPOLOŠKI IZOLATOR: $Bi_{1-x}Sb_x$

Prvi eksperimentalno otkriveni 3D topološki izolator je poluvodička slitina  $Bi_{1-x}Sb_x$ , čije se neobične površinske vrpce mogu prikazati kutno razlučivom fotoelektronskom spektroskopijom, ARPES-om (engl. Angle resolved photoemission spectroscopy). <sup>[4]</sup> Ovaj materijal je legura bizmuta (Bi) i antimona (Sb) te prirodno posjeduje 2 vrlo bitna svojstva: inverzija vrpce pri neparnom broju stanja i otvaranje energetskog procjepa mase materijala u određenom koncentracijskom rasponu ( $x(Sb) = 0.09 - 0.23$ ). 3D  $Z_2$  invarijanta ovog sustava je definirana kao  $(1;111)$ . <sup>[4]</sup> Bizmut antimon slitine ( $BiSb$ ) su se dugo proučavale zbog

termoelektričnih svojstava. Čisti je bizmut polumetal sa jakom spin-orbit interakcijom i njegova je struktura vrpca prikazana na slici 31. [5][4]

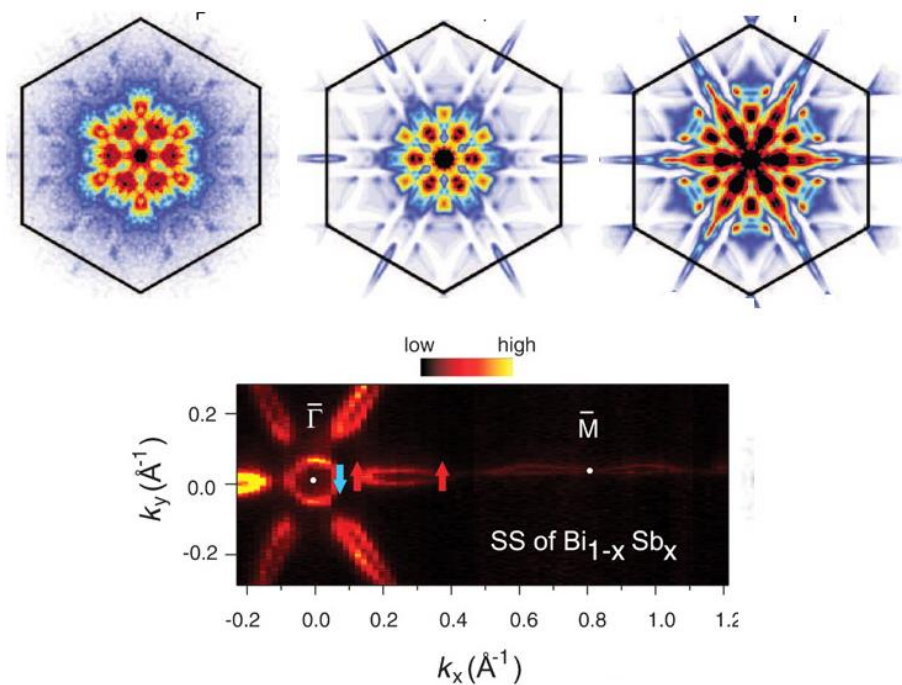


Slika 31. Shematski prikaz vrpca u  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ , koji prelazi iz (a) polumetalnog ponašanja za  $x < 0.07$ , u (b) poluvodičko za  $0.07 < x < 0.22$  pa ponovo u (c) polumetalno za  $x > 0.22$ . [4]

Ispostavilo se da ovakav sustav nije pogodan za detaljnije istraživanje površinskih topoloških stanja zbog složene površinske strukture kako je prikazano na slici 31. [9] Vidljivo je kako se preklapaju valenta i vodljiva vrpca, što vodi do nastanka skupine šupljina pored točke T u Brillouinovoj zoni i skupine elektrona blizu tri ekvivalentne L točke. Valentna i vodljiva vrpca u L točki imaju mali energijski procjep  $\Delta$ . Stanja blizu L imaju gotovo linearnu disperziju dobro opisanu dimenzionalnom Diracovom jednačbom. Ova stanja služe za opis čudnih i zanimljivih bizmutovih svojstava. [4][5] Zamjenom bizmuta sa antimonom, mijenjamo kritične energije vrpčaste strukture. Za udio antimona  $x \approx 0.04$ , procjep se zatvara između  $L_a$  i  $L_s$  te nastaje 3D Diracova točka s disperzijom čestice bez mase. Kako se  $x$  dalje povećava, procjep se otvara sa inverznim svojstvom. Za  $x > 0.07$ , vrh valentne vrpce u točki T se nalazi u razini dna vodljive vrpce u točki L i materijal prelazi u običan izolator. Za  $x \approx 0.09$ , kada vrpca padne ispod valentne vrpce, sustav postaje pravi izolator sa procjepom. Kako se  $x$  dalje povećava, valentna i vodljiva vrpca ostaju razdvojene, te pri  $x \geq 0.22$  valentna vrpca nadilazi vodljivu vrpcu u različitim točkama te dolazi do ponovne uspostave polumetalnog stanja. S obzirom da čisti bizmut i antimon imaju direktni energetski procjep među vrpcama, valentne im se vrpce mogu topološki klasificirati. [4][5] Uspješni eksperimenti električnog transporta u 2D topološkim izolatorima, pokazali su se problematičnim kod 3D materijala, jer je teško odvojiti površinska stanja od



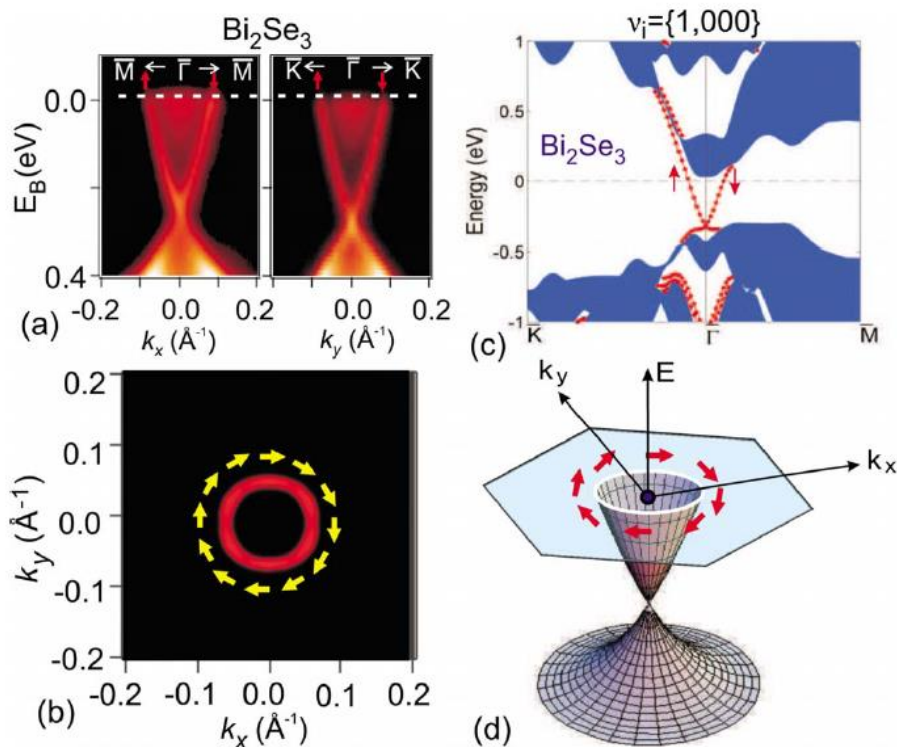
utjecaja volumena tvari. Tehnika ARPES je idealno rješenje za ispitivanje topološkog karaktera površinskih stanja. Metoda koristi foton, koji izbija elektron iz kristala te utvrđuje elektronsku strukturu površine ili volumena pomoću analize momenta emitiranog elektrona. ARPES visoke razlučivosti sa fotonima moduliranih energija omogućava izolaciju površinskih stanja od utjecaja mase tvari zbog činjenice da se za razliku od volumnih stanja, površinska stanja ne dispergiraju okomito na površinu. ARPES može raditi i u spinskom modu, čime se mjeri orijentacija spinova na Fermijevoj površini, što omogućava procjenu Berrijevih faza na površini. Rezolucija spina je od velike važnosti za ispitivanje spiralnosti kod površinskih stanja. Spin polariziranim ARPES-om, napravljena je analiza čistog bizmuta i antimona. Potvrđena je pretpostavka da će površinska stanja Sb nositi Berrijevu fazu i svojstvo kiralnosti za razliku od konvencionalnih spin-orbit metala poput zlata. <sup>[4][5]</sup> U čistom bizmutu, dvije vrpce se spajaju kako bi se formirao središnji elektronski prostor. Ove dvije vrpce su rezultat razdvajanja spina površinskih stanja te je za očekivati da će biti degenerirane. <sup>[4][9]</sup>  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  je jedinstveni materijal među poznatim 3D topološkim materijalima zbog svoje intrinzično visoke mobilnosti 2D nosioca naboja, unatoč što se radi o leguri, te je proučavanje kvantnog transporta iz tog razloga jednostavnije. <sup>[9]</sup>



Slika 32. Prikaz struktura površinskih stanja mjerenih pri Fermijevoj energiji dobivenih tehnikom ARPES spektroskopije. <sup>[4]</sup>

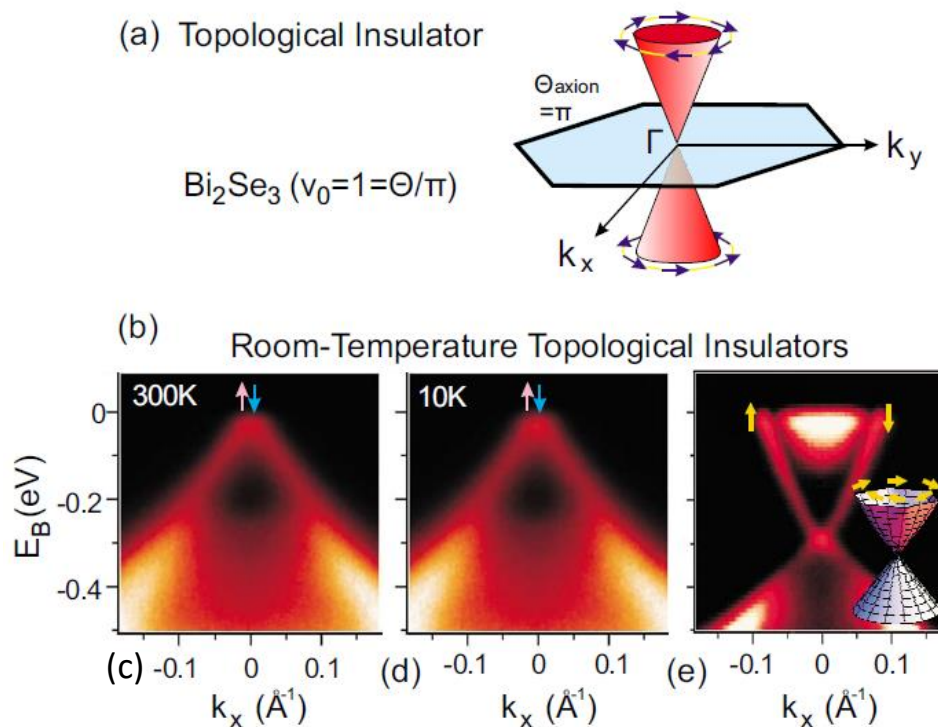
#### 2.6.4. DRUGA GENERACIJA 3D TOPOLOŠKIH MATERIJALA: $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ , $\text{Sb}_2\text{Te}_3$

Površinska struktura vrpce  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ , pokazala se dosta kompliciranom, a energetski procjep između valentne i vodljive vrpce je premali. To je motiviralo znanstvenike da nađu topološko izolatorske materijale sa većim procjepom i jednostavnijim površinskim spektrom. Druga generacija 3D topoloških izolatora, posebno  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , pokazuje topološki zaštićeno ponašanje u običnim kristalima na sobnoj temperaturi čak i izvan magnetskog polja.<sup>[4]</sup> U 2008. godini, grupa je znanstvenika s Princetona pomoću ARPES-a proučavala površinsku energetsku strukturu  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  i pronašla karakterističan potpis topoloških izolatora u obliku jednog Diracovog stošca.<sup>[4][5]</sup> Ovi eksperimenti su pokazali da je ponašanje materijala kao topoloških izolatora povezano sa inverzijom vrpce pri  $k=0$ . Topološka invarijanta  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  je definirana kao  $\{1,000\}$  što se razlikuje od faze u  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$   $\{1,111\}$ .<sup>[9]</sup> Iako je uočena faza bila jednaka po topološkoj invarijanti,  $\nu_0 = 1$ , kao kod  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ , postoje tri bitne razlike, koje novu generaciju 3D topoloških izolatorskih materijala čine pogodnijom za eksperimente.<sup>[4][5][9]</sup>



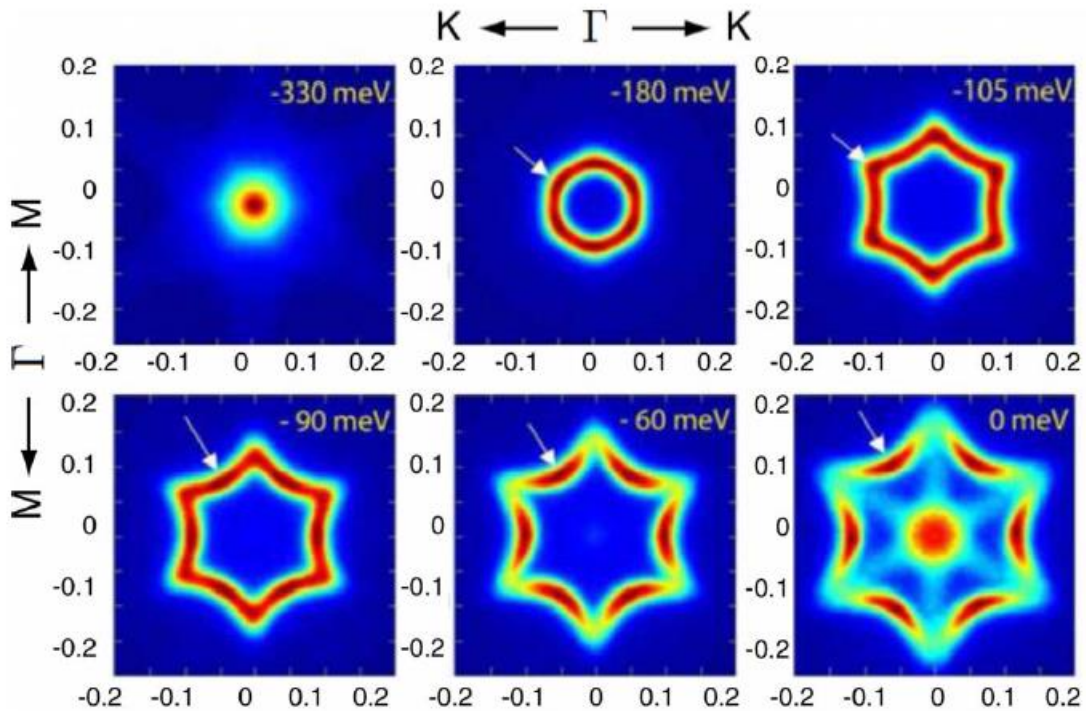
Slika 33. Prikaz površinskih spiralnih Diracovih fermiona sa zaključanim spinskim momentom.<sup>[4]</sup>

Na slici 33. su prikazana slijedeća stanja: (a) Površinska elektronska stanja sa jednim spin-polariziranim Diracovim stošcem dobiveni spektroskopskom tehnikom ARPES. (b) Fermijeva površina sa kiralnom spinskom teksturom. (c) Površinska struktura elektrona  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , gdje potamnjena mjesta predstavljaju volumna tj. stanja u masi materijala, a linije se odnose na površinska stanja. (d) Shematski prikaz disperzije spin-polariziranih površinskih stanja i  $\text{Bi}_2\text{X}_3$  (1;000) topološkom izolatoru. Površinska su stanja  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  proučena spektroskopskom tehnikom ARPES i uočen je jedan gotovo idealan Diracov stožac prikazan na slici 33.(a). Druga je bitna razlika što je  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  dan u stehiometrijskom omjeru (za razliku od slitine poput  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ ) pa se u principu može sintetizirati materijal veće čistoće. Treća i vjerojatno najbitnija razlika je u velikom procjepu od otprilike 0.3 eV (3600 K), koji se može vidjeti na slici 33.(c). Ukoliko se sintetizira materijal vrlo visoke čistoće, ponašanje topološkog izolatora se može vidjeti na sobnoj temperaturi, prikazano na slici 34. , što naravno uvećava potencijal za upotrebu u raznim uređajima.<sup>[4][5][9]</sup>



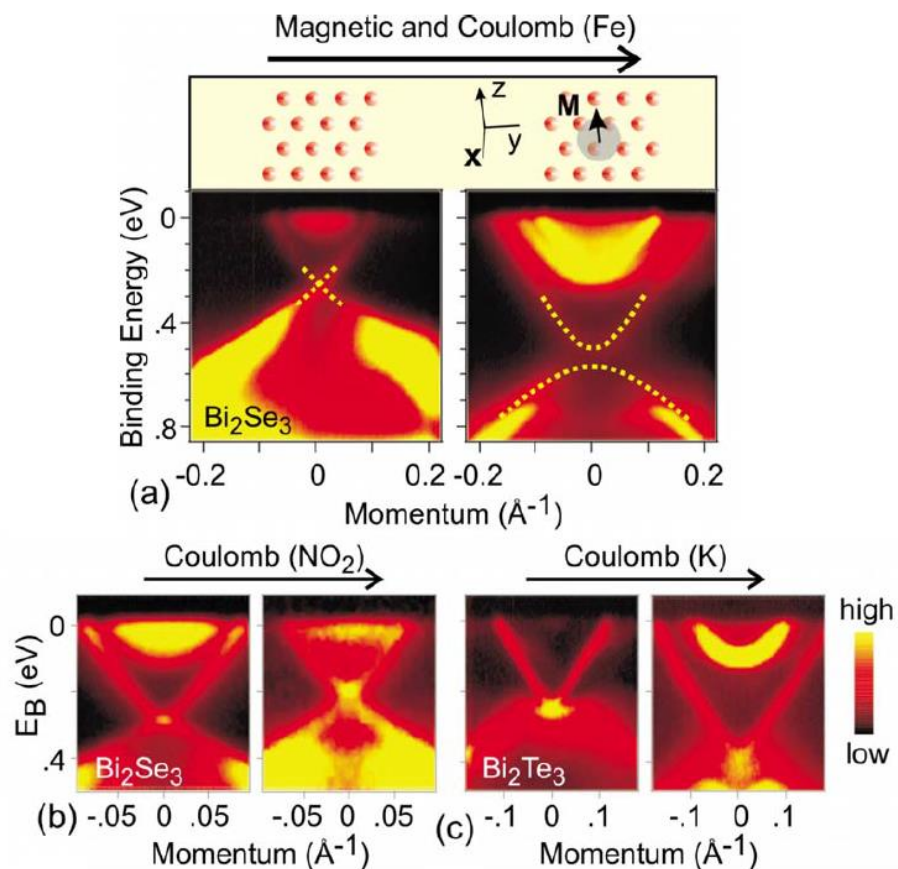
Slika 34. (b) Topološki izolator pri sobnoj temperaturi, rezultati dobiveni tehnikom ARPES; (c) pokazuje zadržavanje svojstava pri  $T=300\text{K}$  i Diracov konus pri sobnoj temperaturi. (d) Diracov stožac pri 10 K. (e) Potpuni Diracov stožac.<sup>[4]</sup>

Pokazana su ključna topološka stanja za  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  koji ima jednostavan spektar Diracovog stošca i veliki energetske procjep. U  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  površinska stanja pokazuju velike devijacije u odnosu na jednostavan Diracov stožac zbog kombinacije manjeg energetske procjepa i jakog potencijala, što je prikazano na slici 35. [4]



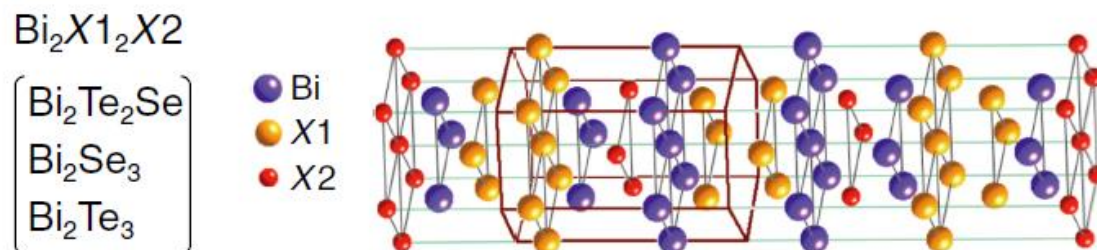
Slika 35. Heksagonalna deformacija površinskih stanja  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  dobivena tehnikom ARPES. [4]

Dva svojstva topoloških izolatora, zaključavanje spinskog momenta površinskih stanja i Berrijeva faza se lako mogu pokazati u  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . Površinska stanja su zaštićena T-simetrijom što implicira da je površinska Diracova točka otporna na prisutstvo nemagnetskih smetnji, ali da dolazi do otvaranja procjepa u prisutstvu smetnji koje prekidaju T-simetriju. Magnetske nečistoće kao što su željezo ili mangan, otvaraju energetske procjep na Diracovoj točki što je prikazano na slici 36. Veličina procjepa je određena interakcijom između Fe iona i površine. Ako se sustav zagadi određenim magnetskim nečistoćama, kao što su  $\text{NO}_2$  ili alkalijski metali kalij i natrij, Diracova točka ostaje netaknuta kao što se može vidjeti na slici 38. [4]



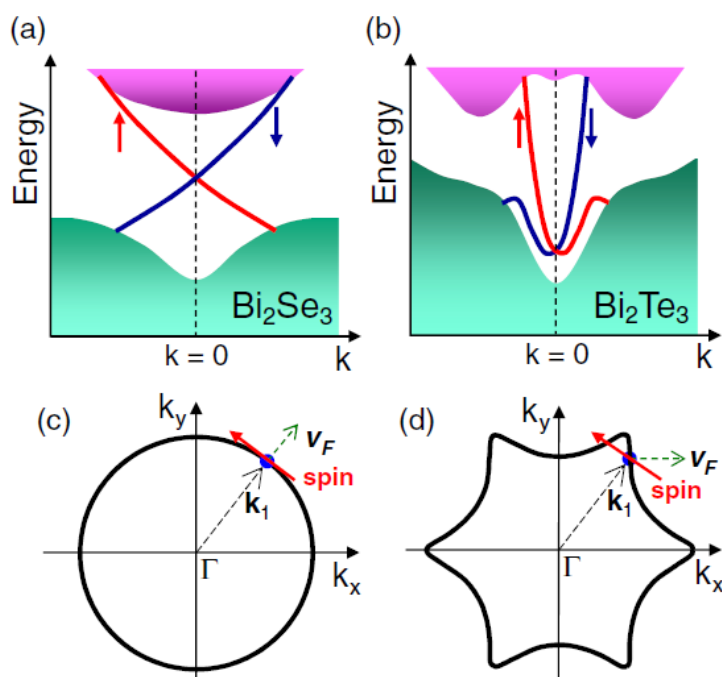
Slika 36. Površinski zaštićena stanja u prisutstvu nemagnetskih nečistoća. [4]

$\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  i  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  kristaliziraju u određenoj tetradimitnoj strukturi, koja se sastoji od višestruko kovalentno povezanih slojeva koji su posloženi prema ABCABC shemi te između postoje slabe Van der Waalsove interakcije prikazano na slici 37. [9]



Slika 37. Prikaz tetradimitne strukture druge generacije topoloških izolatora. [9]

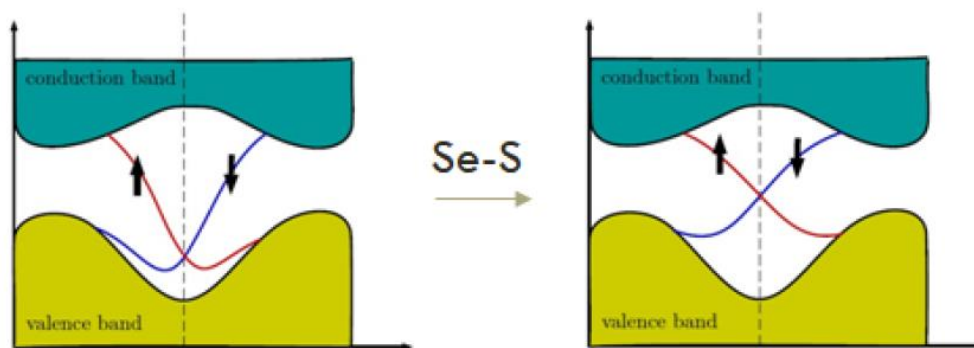
3D  $Z_2$  invarijanta ovih sustava je (1;000) što znači da se topološka površina Diracovog stošca nalazi u centru Brillouinove zone kao što je prikazano na slici 38. Jednostavnost topoloških površinskih stanja i odsutstvo netopoloških stanja čini ove materijale pogodnima za primjenu. Energetski procjep mase materijala  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  je dosta velik, 0.3 eV, pa se ispitivanja mogu vršiti pri sobnoj temperature za dobivanje topološkog izolatora na sobnoj temperaturi. Struktura površinskih stanja  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  je relativno jednostavna te pokazuje idealni Diracov stožac kako je prikazano na slici 38.(a). Suprotno tome, površinska stanja  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  su kompliciranija te je Diracova točka smještena ispod vrha valentne vrpce kako je prikazano na slici (b). Još jednu razliku možemo vidjeti na slikama (c) i (d) gdje je obris konstantne energije Diracovog stošca kružan za  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , a heksagonalan za  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  što rezultira neobičnom fizikom materijala. [9]



Slika 38. Struktura površinskih stanja  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  (a,c) te  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  (b,d). [9]

Sva su bitna svojstva topoloških stanja nove generacije demonstrirana na  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , jer on ima najjednostavniju stožastu strukturu Fermijeve površine i najveći procjep između valentne i vodljive vrpce.  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  pokazuje velike devijacije od jednostavnog Diracovog stošca, ali je zbog povoljnih termoelektričnih svojstava već pronašao upotrebu u termoelektričnim inženjerskim sustavima blizu sobne temperature. [4][5]

Problem sa većinom poznatih 3D topoloških izolatora, bila je njihova mala volumna otpornost. Smanjivanjem temperature raste otpornost kod izolatora pa tako i u unutrašnjosti topoloških izolatora. Veća otpornost unutrašnjosti (volumena) kristala znači da će na višim temperaturama vodljiva površina dolaziti do izražaja te će se generalno površinska stanja moći bolje i preciznije promatrati. Nakon materijala druge generacije, velika je unutrašnja otpornost u kombinaciji sa čistim kvantnim oscilacijama uočena u tetradimitnom topološkom izolatoru  $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$  (BTS).<sup>[5]</sup> U tom su materijalu halkogeni elementi (Te i Se) raspoređeni na različitim mjestima u kristalnoj rešetci i formiraju uređene Te-Bi-Se-Bi-Te slojeve.<sup>[5]</sup> Pokazano je da je takav raspored s gledišta kemije povoljan za smanjenje defekata u kristalu, a sam je materijal povoljan za proučavanje instrinzičnog režima topološkog izolatora u kojem su volumni nosioci naboja zanemarivi.<sup>[5]</sup> Smatrano je da se mogu postići bolja volumno-izolacijska svojstva kod halkogenih tetradimitnih topoloških izolatora pa se u tom pogledu zanimljivom pokazala čvrsta otopina  $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  (BSTS), jer je za neke kombinacije x i y vodljivost materijala iznimno niska.<sup>[5]</sup> Osim za kompozicije bliske  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ , BSTS kristalizira u romboedarskoj strukturi poput  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  i  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ . Očekuje se da će BSTS biti topološki izolator sve dok ima romboedarsku strukturu. Valja primjetiti da i BTS spoj, u kojem se pojavljuje uređenje halkogenih elemenata, spada u ovu skupinu. ( $x=0, y=1$ ).<sup>[4][5]</sup>



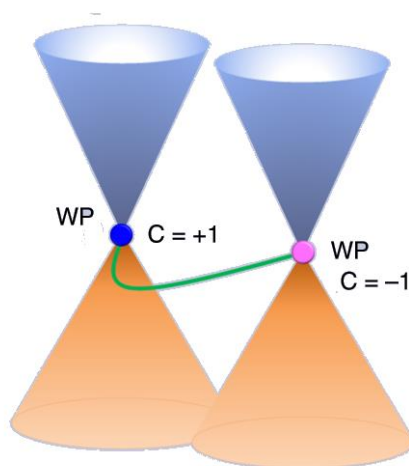
Slika 39. Shematski prikaz pomicanja Diracove točke zamjenom selenija sumporom.<sup>[5]</sup>

Dva su dominantna električna defekta, koja se pojavljuju u BSTS, a to su defekt zamjene mjesta (Bs,Sb)/Te u rešetci i praznina na mjestu Se atoma. Specifičnim omjerima x i y se mogu maksimizirati volumna izolacijska svojstva u vidu poništavanja nosioca naboja suprotnih

predznaka. Slika 39. prikazuje kako su optimizirane kompozicije čvrstih otopina za izolatorsko ponašanje. Za kompoziciju sa  $(x; y) = (0:5; 1:3)$ , postignuta je najveća otpornost. U kompoziciji  $\text{BiSbTeSe}_2$  Fermijeva je energija blizu Diracove točke, koja se nalazi u ravnini sa nekim stanjima valentne vrpce, a supstituiranjem selenija sa sumporom i telurijem dobivamo  $\text{BiSbTe}_2\text{S}$  u kojem se Diracova točka energetski pomiče od stanja valentne vrpce pa su efekti topološkog izolatora izraženiji. <sup>[4][5]</sup>

### 2.6.5. WEYLOVI POLUMETALI

Topološki polumetali su materijali čija struktura vrpce sadrži dodirne točke koje su topološki netrivialne te se na njima mogu nalaziti ekscitirane kvazi-čestice koje se ponašaju kao Diracovi ili Weylovi fermioni. <sup>[14]</sup> Weylovi polumetali su materijali u kojima elektroni imaju linearnu disperziju u svim smjerovima, te dolazi do dvostruke degeneracije tih elektrona u jednoj točki. Ta točka se naziva Weylova točka te se nalazi blizu Fermijeve površine u tri dimenzije. <sup>[14]</sup> Weylove točke se osim u elektroničkim sustavima mogu naći i u umjetnim periodičkim strukturama sa valnim svojstvima, kao što su elektromagnetski valovi u fotonskim kristalima. <sup>[14]</sup>



Slika 40. Trodimenzionalni Weylov polumetal.

Weylove točke predstavljaju degenerirane trodimenzionalne linearne točke između dviju vrpca. <sup>[15]</sup> Weylove točke možemo usporediti sa Diracovim točkama u dvije dimenzije te su one povezane sa površinskim stanjima te samim time predviđa se da su topološki netrivialne.



Weylove točke su stabilne u prostoru, ali tek se trebaju otkriti eksperimentalno u prirodi.<sup>[15]</sup> Pri energijama i frekvencijama Diracove točke, 2D elektroni pokazuju zanimljiva svojstva. Kao ilustrativni primjer, mogu se dati svojstva grafena, koja su usko povezana uz Diracove fermione bez mase na Fermijevoj energiji.<sup>[15]</sup> Čestice bez mase slijede Diracovu jednadžbu za bezmasene čestice, isto kao i Weylovi fermioni koji imaju određenu kiralnost koja ih štiti od nastajanja procjepa kako je prikazano na slici 40.<sup>[9]</sup> Rezultat te jednadžbe je valna funkcija koja opisuje relativističko ponašanje čestica bez mase sa spinom 1/2. Weylove točke (WP) odvojene u prostoru imaju različitu kiralnost ( $C = +1$  i  $C = -1$ ) te su povezana preko površinskih stanja, npr. pomoću Fermijeve luka prikazanog na slici 40.

## **2.7. PRIMJENA TOPOLOŠKIH IZOLATORA**

Spin-orbit interakcije su predmet istraživanja znanstvenika već duže vrijeme jer su one odgovorne za određena svojstva materijala. Proučavanje spin-orbit interakcija u magnetnim materijalima dovodi do saznanja o najpovoljnije smjeru magnetizacije materijala što je vrlo bitno za tehnološke primjene. U drugu ruku, proučavanje spin-orbit interakcija nemagnetnih materijala je tek nedavno, sa razvojem spintronike, počelo biti područje od interesa. Spintronika je područje koje koristi spin elektrona kao glavno svojstvo elektroničkih uređaja.<sup>[13]</sup> Topološki izolatori su pokazali dobar potencijal za primjenu u ovakvim uređajima jer se može manipulirati orijentacijom spina i površinskim elektronima pomoću kvantnog tuneliranja, ali još uvijek su potrebna dodatna istraživanja kako bi se doznala sva svojstva. Još jedna zanimljiva potencijalna primjena topoloških izolatora je dobivanje Majorana fermiona.

### **2.7.1. MAJORANA FERMIONI**

Trenutno najzanimljivija potencijalna primjena topoloških izolatora je dobivanje Majorana fermiona. Kao i svi fermioni, i Majorana fermioni su određeni poluspinskim brojem, ali razlika je u tome što su oni identični svojim antičesticama što znači da se par čestica-antičestica može sam poništiti.<sup>[13]</sup> O ovim česticama se govori već duže vrijeme, ali još nema točno definiranog eksperimentalnog dokaza o njihovom postojanju. Trenutni eksperimenti predlažu da čestica neutrino zapravo može biti Majorana fermion što je temeljeno na

dvostrukom nuklearnom beta raspadu.<sup>[13]</sup> U fizici kondenzirane materije, Majorana fermioni se mogu pojaviti kao nefundamentalne kvazi-čestice u određenim supravodičima.<sup>[13]</sup> Ovakvo stanje je dozvoljeno jer par kvazi-čestica može tvoriti Cooperov par te nestati u supravodiču.<sup>[13]</sup> U fizici kondenzirane materije, Cooperov par predstavlja par elektrona (ili drugih fermiona) koji su vezani na određeni način pri niskim temperaturama. Proizvoljno male interakcije između elektrona u metalu, mogu uzrokovati da stanje uparenih elektrona ima manju energiju od Fermijeve energije, što ukazuje na činjenicu da je došlo do povezivanja elektrona u par. U klasičnim supravodičima, privlačnost je rezultat elektron-fonon interakcija.<sup>[16]</sup> Iako je nastajanje Cooperovih parova kvantni efekt, objašnjenje se može dati klasičnim opisom. Elektron u metalu se ponaša kao slobodna čestica koja se odbija od drugih elektrona zbog istovrsnog negativnog naboja, ali privlači pozitivne ione koji sačinjavaju kristalnu rešetku. To privlačenje uzrokuje nepravilnosti u rešetci te dolazi do pomicanja iona bliže elektronu što rezultira većom gustoćom pozitivnog naboja u blizini koji može uzrokovati privlačenje daljih elektrona. Na većim udaljenostima, privlačna sila između elektrona nadjačava odbojnu silu te dolazi do uparivanja. Kvantno mehaničko objašnjenje pokazuje da do ovog efekta dolazi zbog elektron-fonon interakcija gdje fonon predstavlja ukupno gibanje pozitivno nabijene rešetke.<sup>[16]</sup> Kako bi se u fizici kondenzirane materije došlo do Majorana fermiona, koji bi mogli biti korišteni za izradu kvantnog računala tolerantnog na greške<sup>[13]</sup>, potrebno je dostići simetriju čestica i praznina u nedegeneriranom spinskom sustavu.<sup>[9]</sup> To se može postići u supravodičima u kojima niskoenergetske kvazi-čestice slijede Bogoliubov-de Gennes jednadžbu.<sup>[9]</sup> Otežavajuća činjenica je da se moraju koristiti određeni supravodiči, topološki supravodiči, kako bi se proizveli Majorana fermioni. Međutim, Majorana fermione možemo proizvesti i pomoću običnog supravodiča, kao što je niobij, ukoliko ga kombiniramo sa topološkim izolatorom. Ako se supravodič stavi u kontakt sa topološkim izolatorom, površinska stanja će postati supravodljiva.<sup>[13]</sup> Ako se u obzir uzme granica između topološkog izolatora i supravodiča, može doći do tuneliranja Cooperovih parova iz supravodiča na površinu što vodi do induciranog supravodljivog energetskog procjepa na površinskim stanjima.<sup>[4]</sup> Rezultirajuća 2D supravodljiva stanja se razlikuju od običnih supravodljivih stanja po tome što nisu spin degenerirana i sadrže samo pola stupnjeva slobode normalnog metala te ne prekidaju T simetriju.<sup>[4]</sup>

### 3.EKSPERIMENTALNI DIO

#### 3.1. SVRHA RADA

U ovom preglednom radu, svrha je bila dati teorijski pregled saznanja o topološkim izolatorima kao i o pojavama na kojima se topološki izolatori zasnivaju. Zbog nemogućnosti provođenja vlastitog eksperimenta, u ovom dijelu rada će se ukratko prokomentirati eksperimentalne spoznaje o topološkim izolatorima, dok će se za detaljnije eksperimentalne spoznaje, čitatelji moći osvrnuti na dane reference.

#### 3.2. SINTEZA TOPOLOŠKIH IZOLATORA

Osim  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ , svi potvrđeni materijali sa svojstvima topoloških izolatora su halkogenidi. To su spojevi koji sadrže halkogeni atom kao što su sumpor, selenij ili telurij. Budući da su halkogeni atomi hlapljivi, sinteza se obavlja u zatvorenim kvarcnim sustavima koji mogu izdržati temperature do  $1000^\circ\text{C}$ . Takvi uvjeti limitiraju raspon mogućih tehnika rasta kristala te se obično koristi Bridgmanova metoda. Većina poznatih materijala, kao što su  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  te  $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ , se dobiva pomoću Bridgmanove metode koja se zasniva na tome da se temperatura postepeno smanjuje uz očuvanje temperaturnog gradijenta.<sup>[4]</sup> Druga tehnika za rast kristala je transport para. U ovoj tehnici, dio polikristaliničnog materijala se stavi na jedan kraj zatvorene kvarcne kivete koja se duže vrijeme drži u pećnici sa određenim temperaturnim gradijentom. Temperaturni gradijent se odabire na način da materijal sublimira na toplijem dijelu kivete, te kristalizira negdje na hladnijem dijelu. Ukoliko se za transport koristi određeni reagens (poput  $\text{I}_2$ ), tehnika se naziva kemisjki transport para, a ako materijal lako sublimira, transporter nije potreban te se tehnika naziva fizikalni transport para.<sup>[4]</sup> Budući da se tetradimitne komponente cijepaju lako, moguće je postići vrlo tanke filmove reda veličine nekoliko nanometara.<sup>[4]</sup> Za postizanje vrlo tankih filmova navedenih materijala, koristi se tehnika epitaksija molekularnim snopom (engl. Molecular beam epitaxy, MBE). MBE je tehnika rasta kristala sloj po sloj, koja se bazira na reakciji molekularnih ili atomskih snopova sa ugrijanim kristaliničnim supstratom u visokom vakuumu.<sup>[16]</sup> Druga metoda koja se može koristiti je kemijska depozicija para (engl. Chemical vapor deposition, CVD), ali dobiveni filmovi su lošiji nego filmovi dobiveni pomoću

MBE. <sup>[16]</sup> Za epitaksijalni rast tankih filmova vrlo je bitno podudaranje kristalnih rešetki substrata i rastućeg materijala. Međutim, u slučaju topoloških izolatora, zbog postojanja van der Waalsovih sila, to podudaranje nije od presudne važnosti te se epitaksijalni rast opisuje slabim vdW interakcijama između substrata i rastućeg materijala. <sup>[4]</sup> Na eksperimentu sa  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , pokazalo se da je kontrola temperature supstrata najbitniji faktor za dobivanje visokokvalitetnih filmova. Pokazalo se da je najbolji pristup metoda u dva koraka gdje se depozicija prvog sloja i svih sljedećih slojeva događaju pri različitim temperaturama kako bi se poboljšala početna adhezija te naknadna kristalizacija. <sup>[4]</sup>

Za ranije navedene metode, obično je potrebno dugo vrijeme reakcije, visoke temperature, veliki utrošak energije te otrovna otapala. Ti nedostaci se mogu zaobići ako se koristi mikrovalna sinteza. Mikrovalno ozračivanje je puno efikasnije od normalnog zagrijavanja, budući da direktno prenosi energiju na molekule, tj. nema gubitaka energije na okolinu. Posljedica toga je ujednačeno i brzo zagrijavanje materijala, što je suprotno efektima normalnog zagrijavanja. Sinteza mikrovalnim putem smanjuje reakcijsko vrijeme te daje efikasniji proces za dobivanje materijala te se s toga razmatra i za sintezu topoloških izolatora. <sup>[3]</sup>

Za detaljnija saznanja o eksperimentalnim metodama i karakterizaciji topoloških materijala, čitatelji se mogu osvrnuti na sljedeće reference: [3], [4], [5], [11].

#### 4. RASPRAVA I ZAKLJUČAK

Budući da nije bilo mogućnosti izrade eksperimenta za ovaj rad, nema niti vlastitih rezultata prema kojima bi se mogli donjeti neki realni eksperimentalni zaključci. Iz tog razloga, ovo poglavlje služi za iznošenje poznatih činjenica i komentara vezane uz same topološke izolatore i njihovu potencijalnu primjenu.

Topološko stanje materije je otkriveno u prošlom stoljeću te je dovelo do otkrića materijala sa neobičnim elektronskim svojstvima, topoloških izolatora. Iako su temeljna svojstva topoloških izolatora poznata, ovo područje je još uvijek u ranoj fazi razvoja te je potrebno još puno istraživanja i eksperimenata kako bi došli do svih saznanja o tim egzotičnim materijalima. Topološki izolatori su materijali koji imaju interesantna svojstva. Kao i normalni izolatori, topološki izolatori, u masi tvari, imaju energetski procjep koji razdvaja valentnu i vodljivu vrpcu. Ono što je karakteristično za topološke izolatore su površinska elektronska stanja koja nemaju energetski procjep. Drugim riječima, topološki izolatori su materijali koji se u masi tvari ponašaju kao izolatori, dok na površini imaju vodljiva elektronska stanja kao metali, što ih klasificira pod vodiče. Vodljiva površinska stanja, ili kiralna rubna stanja ukoliko se radi o dvodimenzionalnom sustavu, su topološki zaštićena simetrijom vremenske inverzije što znači da nisu osjetljiva na male promjene i nečistoće. Ta površinska elektronska stanja nam pokazuju kako se radi o sustavu sa svojstvima drugačijim od bilo čega do sad poznatoga te su upravo ona zaslužna za čudnovata, ali zanimljiva svojstva topoloških izolatora.

Topološki izolatori u budućnosti imaju moguću primjenu u spintronici i kvantnom računalstvu. Također, inovacije idu u smjeru otkrivanja novih topoloških heterostruktura, kojima je cilj očuvanje i kontrola površinskih stanja. Upravo su ta vodljiva površinska stanja ključna za daljnji napredak, iz razloga što preko njih dolazimo do novih saznanja o topološkom stanju materije te nas približavaju razvoju novih stanja materije kao što su Majorana fermioni. Iako se ovo područje razvija u dobrom smjeru, još je potreban velik napredak u području materijala kako bi se našli odgovarajući magnetski i supravodljivi materijali koji pokazuju prikladna svojstva i odgovarajuća površinska tj. rubna stanja.

## 5. POPIS SIMBOLA

$TI$  – topološki izolator

$1D$  - dvodimenzionalno

$2D$  - dvodimenzionalno

$3D$  – trodimenzionalno

$T$  – relaksacijsko vrijeme

$V$  – pad napona

$I$  – jakost struje

$R$  - otpor

$\sigma$  - otpornost

$E$  – električno polje

$j$  – gustoća struje

$L$  – duljina

$A$  – poprečni presjek

$v$  – brzina

$\rho_{xx}$  – magnetootpor

$B$  – magnetsko polje

$R_H$  – Hallov koeficijent

$\omega_c$  - ciklotronska frekvencija

$\nabla$  - gradijent

$S$  – Seebeckov koeficijent

$c(E)$  - vodljivost u ovisnosti o energiji

$f(E)$  - Fermi-Diracova raspodjela

$T_F$  - Fermijeva temperatura

$n_i$  - broj čestica u stanju  $i$

$\mu$  - kemijski potencijal

$k$  - Boltzmannova konstanta

$T$  - apsolutna temperatura

$p$  - količina gibanja

$g$  – genus

$\chi$  – Eulerov broj

$d_0$  – konstanta rešetke

$E_g$  – energija zabranjene zone

$u(k)$  - periodičko svojstveno stanje ćelije

$H$  – Hamiltonijan

$G$  - recipročni vektori rešetke

$E_F$  – Fermijeva energija

C – ugljik

Si – silicij

Ge – germanij

As – arsen

In – indij

C – petlja

$P$  – polarizacija

$Q_{\text{end}}$  – naboj na krajevima

$Q$  - Chernov broj

$F_{nm}$  – Berryjevi fluksevi

QHE – kvantni Hall efekt

QSHE – kvantni spin Hall efekt

$\sigma_{xy}$  – Hallova vodljivost

2DEG – dvodimenzionalni elektronski plin

$\sigma_{xy}^S$  – Hallova vodljivost za spinske čestice

Cd – kadmij

Hg – živa

Te – telurij

$d_c$  – kritična debljina sloja

Sb – antimon

Al – aluminij

Ga – galij

Bi – bizmut

ARPES - kutno razlučiva fotoelektronska spektroskopija

WP – Weylova točka

MBE - epitaksija molekularnim snopom

CVD - kemijska depozicija para



## 6. LITERATURA

- [1] E. Burstein, A. H. MacDonald, P. J. Stiles, Contemporary Concepts of Condensed Matter Science, Topological Insulators, Volume 6, Elsevier, 2013.
- [2] <http://www.enciklopedija.hr/natuknica.aspx?ID=61809> (pristup 17. rujna 2019.)
- [3] V. Pereira, Synthesis and transport properties of nanostructured topological insulators, Department of Physics, University of Coimbra, September 2016.
- [4] M. Z. Hasan, C. L. Kane, Colloquium: Topological insulators, Rev. Mod. Phys., Vol. 82, No. 4, October–December 2010,
- [5] B. Gudac, Sinteza i karakterizacija uzoraka topoloških izolatora mjerenjem transportnih i termoelektričnih svojstava, Diplomski rad, Zagreb, 2017.
- [6] M. Metikoš-Huković, Elektrokemija, Interni udžbenik, Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije, Zagreb, 2000.
- [7] I. Kokanović, Osnove fizike materijala, predavanje vodljivi polimeri, Prirodoslovno-matematički fakultet u Zagrebu.
- [8] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, Topological Insulators and Topological Superconductors, Princeton University Press, Princeton and Oxford, 2013. , 1-175.
- [9] Y. Ando, Topological Insulator Materials, Journal of the Physical Society of Japan 82 (2013) 102001, 1-32
- [10] J. K. Asboth, L. Oroszlany, A. Palyi, A Short Course on Topological Insulators, Band-structure topology and edge states in one and two dimensions, Springer, September 2015., 1-49, 79-155.
- [11] C. Castenmiller, J. Bosma, Superconductivity in the doped topological insulator  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , Twente, 2014. , 1-19.
- [12] N. W. Ashcroft, D. Mermin, Solid State Physics, 1st ed. Saunders College Publishers, 1976.
- [13] C. Kane, J. Moore, Topological insulators, Physics World, February 2011.
- [14] Feng Li, Xueqin Huang, Jiuyang Lu, Jiahong Ma, Zhengyou Liu, Weyl points and Fermi arcs in a chiral phononic crystal, Nature Physics, Vol. 14, January 2018., 30-34


- [15] L. Lu, L. Fu, J. D. Joannopoulos, M. Soljačić, Weyl points and line nodes in gapless gyroid photonic crystals, Department of Physics, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts 02139, USA, July, 2012.
- [16] [https://en.wikipedia.org/wiki/Cooper\\_pair](https://en.wikipedia.org/wiki/Cooper_pair) (pristup 19. rujna 2019.)
- [17] F. Kirtschig, Topological  $k \cdot p$  Hamiltonians and their applications to uniaxially strained Mercury telluride, Dresden, 2017.
- [18] Y. Pan, Experimental investigation of topological insulators and superconductors, Amsterdam, 2016.
- [19] V. V, Nemytov, Topological Insulators: Theory and Electronic Transport Calculations, Master Thesis, Montreal, Quebec, 2012.
- [20] M. Bianchi, Electronic structure and electron dynamics of the topological insulator  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , PhD Thesis, Aarhus, 2013.
- [21] A. A. Soluyanov, Topological Aspects Of Band Theory, New Brunswick, New Jersey, October, 2012.
- [22] J. Singleton, Band Theory and Electronic Properties of Solids, Oxford University Press, New York, 2001.

## 7. ŽIVOTOPIS

### Osobni podaci:

Ime: Juraj

Prezime: Milačić



### Obrazovanje:

2016. – 2019. Sveučilišni diplomski studij Primijenja kemija,  
Modul specifični materijali i napredne tehnologije,  
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,  
Sveučilište u Zagrebu

2013. – 2016. Sveučilišni preddiplomski studij Primijenja kemija,  
Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije,  
Sveučilište u Zagrebu

2009. – 2013. XVI. Gimnazija Zagreb

2001. – 2009. OŠ Brestje